量子力学演習

―シッフの問題解説―

井上　健　監修
三枝寿勝
瀬藤憲昭　共著

物理学叢書
別巻

吉岡書店

量子力学演習

—シッフの問題解説—

井上　健　監修

三枝寿勝
瀬藤憲昭　共著

物理学叢書
(別　巻)

吉岡書店

まえがき

本書はL．I．シッフ「量子力学(第三版)」(井上健訳，吉岡書店 1971年刊)の各章末にあげられた問題の全部を収録し，それに解答の大筋を付したものである．シッフの「量子力学」はこの分野の標準的な教科書・参考書として，初版刊行以来原著・訳書ともどもかなり広く利用されてきたものである．この間に，問題の解答ないしはヒントをつけてほしいとの希望が，かなりの数の読者から訳者に寄せられた．今回，かつて京都大学理学部物理学教室の湯川研究室で訳者とともに勉強した瀬藤憲昭氏（京大工学部数理工学教室助手）・三枝寿勝氏の協力を得て，この種の要求に応えて本書を編むことができた．

本書に収められた問題は，原著者がその序文で述べているように，本来，原書の本文で述べられた諸点を具体的にはっきりさせたり，強調したりするための役割を果すものである．その意味では当然，本文と併読することによって原著者の期待したように有機的に利用されることが最も望ましい．しかし，計算的な問題以外のやゝ記述的な性格の問題に対しても，十分ではないが一応の解答を付しておいたので，本書だけでも一応量子力学の解説書として利用していたゞけるのではないかと思っている．

演習問題は自力で解くのが，学習上の効果として最も有効であることは勿論であり，その意味で本書のごとき問題解答集の功罪については種々意見があるであろう．一般的にいって，不利な条件のもとで独学で勉強する人達にとっては少なくとも無用の挫折感から救済するためにお役に立てばと思っている．さらに，量子力学は現代の自然科学一般の基礎として今や極めて広い応用分野をもっている．一方，古典力学に比べてその数学的手法がなじみうすい面もあり，そのため量子力学は極めて抽象的なものであると初めから決めてかゝる向きが少なくない．筆者の経験では，基礎的な勉強のために十分な時間

をさくことの難しい応用科学畑の学生に，この傾向が比較的に多いように思われる．その結果，「シュレーディンガー方程式を解いてその結果を利用してはいるものの，元のシュレーディンガー方程式自体を理解していると思えない」との声をきくこともある．しかし，決してニュートン力学が量子力学に比べて抽象的でないというわけではない．専門の論文の消化や実際の研究に進む以前の段階で，具体的な問題の解にできるだけ数多くなれておくことは，量子力学の物理的な意味を把握する上には一つの有効な方法であろう．本書がその意味での一助にもなれば幸いである．

本書は先に述べたように原書第三版（1970年刊）の問題を収めてある．第三版においては第二版までの問題にかなりの取捨選択および追加がなされている．たゞし初版以来のものも少なくない．その意味で第二版以前の問題の一部の解答を収めた西山敏之・内山龍雄共著「量子力学演習」（共立全書）を参照させていたゞいた。こゝに記して御礼申しあげる。

1971年6月

井上　健

【記号，その他について】

解答の文中にあらわれる“公式集**頁”というのは“数学公式Ⅲ-特殊函数-；森口繁一，宇田川銈久，一松信著（岩波全書，1968年）の**頁”ということである．

解答文中に第三版の教科書の式や図をしばしば引用しているが，対応するものが第二版にもあれば［　］の中に番号を記してある．ただし，第三版と第二版で番号が一致していれば［〃］と記した．

1982年春，東京大学教養学部基礎科学科4年の廣井孝弘氏から約350項目にわたる正誤表を吉岡書店を通じて受け取った．検討の結果2，3項目を除いて指摘はすべて正しいことがわかり同氏の表に従って訂正を行った．また検討中，著者が気付いた誤りもついでに数箇所訂正しておいた．廣井氏の御好意に深く感謝する．

なお，これは1971年に書くべきであったが本書の出版に際して吉岡書店の上川正司氏に一方ならず御厄介になった．12年遅れの謝意を表するものである．

1983年2月　著　者

目　　次

第Ⅴ章　連続固有値：衝突の理論

□問　題□

第Ⅵ章　量子力学の行列形式

□問　題□

第Ⅶ章　量子力学における対称性

□問　題□

第Ⅷ章　束縛状態に対する近似法

□問　題□

第IX章　衝突の理論における近似法

□問　題□

第X章　同一粒子とスピン

□問　題□

第XI章　輻射の半古典論的取扱い

□問　題□

第XII章　原子・分子・原子核

□問　題□

第XIII章　相対論的波動方程式

第XIV章　波 動 場 の 量 子 化

第 I 章

量子力学の物理的基礎

問題 I－1　［第２版，I－問１と同一］

第１表で参照した種々の実験をそれぞれ簡単に記述し，その解釈を合わせて述べよ．

〔※〕 量子論の出発点となったのは，実験で観測された≪黒体輻射≫のエネルギー分布を古典力学の範囲内では説明できないということであった．

19世紀の半ばすぎ Kirchhoff により黒体(投射されたすべての輻射線を吸収する物体)の概念が導入され，黒体輻射のエネルギー分布が理論，実験の対象となった．Wien が提唱した分布式は輻射の振動数が大きいところでよく実験と合うが，小さいところでは合わない．また Rayleigh，少し後に Jeans が提唱した式は逆に振動数の小さいところで実験をよく説明するが，大きいところでは駄目であった．Planck (1900) は振動数 ν が小さいところで Rayleigh-Jeans の式に，大きいところで Wien の式に近づく式として

$$u(\nu)d\nu=\frac{8\pi h}{c^3}\,\frac{1}{\exp[h\nu/\kappa T]-1}\nu^3 d\nu$$

($u(\nu)$：振動数が ν と $\nu+d\nu$ の間にある単位体積当りの黒体輻射エネルギー)

を提唱した．この式は実験と合わせるために導かれた式であったが，これを理論的に導くために Planck は“エネルギー量子”の考えに至った．つまり同じ振動数 ν を持つ振動子の集まりの全エネルギーは，あるエネルギー要素 ϵ の整数倍の値しかとれず，またエネルギー要素 ϵ は振動数 ν に比例しその比例定数がプランクの定数 h というわけである．

このエネルギー量子仮説を一般化し≪光電効果≫の実験を説明しようと試みたのが Einstein (1905) であった．光電効果とは，金属の表面に電磁波をあてると電子が跳び出てくる現象で，19世紀の終り頃その性質が調べられて

⊙電子が跳び出すのは電磁波の振動数 ν がある値 ν_0 を越えたときのみである．

⊙電磁波を強くすると跳び出してくる電子の個数が多くなるだけである．

⊙跳び出した電子のエネルギーは，電磁波の強度やその発生源と金属との距離にかかわりなく $\nu-\nu_0$ に比例して大きくなる．

ということがわかっていた．この事実を定性的に説明するため Einstein は光量子仮説を立て，振動数 ν の光はエネルギー $h\nu$ をもった“かたまり”のごとくふるまうとし，跳び出してくる電子のエネルギーは $h\nu-P$（Pは金属から電子をひきはなすのに必要なエネルギー（$=h\nu_0$））とした．この光量子仮説は光電効果の実験事実をよく説明するにもかかわらず，なかなか受け容れられなかった．光は波であって粒子ではないという考えが圧倒的に強かったからである．

光を粒子であるとし Newton 力学の範囲でその性質を説明しようとする試みが Newton 自身やその後の人によってなされたが，Young (1802) の≪光の干渉≫実験により，光の波動説が確立した．そして Maxwell の電磁波理論が出るにおよび，“場”という Newton 力学の粒子概念と全然別な概念が導入され，19世紀にはこの二つの理論が共存し，粒子と波動との対立がますます激しくなっていった．この光の波動説，つまり Maxwell 力学に挑戦したのが光量子仮説であったのである．

しかしその後にも光量子仮説を支持する実験が現われた．その一つに≪Compton (1923) によるX線と電子の散乱の分析≫がある．この散乱において入射X線の波長よりも散乱されたX線の波長の方が長くなるという実験結果（Compton 効果）を，光量子仮説を用いて説明し，しかもこの波長のずれの実験値と理論値（Compton 波長）とが大変よく一致することもわかった．

量子概念を輻射の理論以外に最初に適用したのが Einstein の光量子仮説であったが，それは今述べたごとく，当時支持されなかった．しかし Einstein (1907) は分子運動論にこの概念を適用し≪比熱の理論≫で成功を収めた．古典分子運動論では，自由度3の原子から成る固体の比熱は温度に無関係に，1モル当り $3R$ であったが (Dulong-Petit)，温度が下がるにつれて比熱が小さくなることが観測されていた．Einstein は Planck のエネルギー分布関数を用いて，比熱を温度 T の関数として求め，実験とよく合う式を得た．ただしこの式は極低温で実験と少しのずれを生じ，Debye (1912) は Einstein の考えを精密化してこのずれを訂正する式を導いた．これにより量子概念は輻射論に固有な概念ではなく，もっと普遍的な概念であることが明らかにされたのである．

一方19世紀後半には原子からの輻射線のスペクトルの研究もさかんに行なわれていた．Rydberg (1890) は観測されたスペクトルをその波長よりもその波数（∝ 波長の逆数）で分析する方が見通しがよいことを見出し，あるスペクトルの系列の波長をまとめて表わす式を導き，また Ritz (1908) は，Rydberg の考えをさらに明確にし，原子のスペクトルの振動数は二つの項の差で表わせ，各々の項はある整数を含んでいるという ≪Ritz の組合わせ法則≫

$$\nu = Rc\left(\frac{1}{\tau_1{}^2} - \frac{1}{\tau_2{}^2}\right) \qquad \tau_1, \tau_2 \text{ 整数}$$

を導いた．Bohr は上の式からヒントを得て Rutherford の水素原子模型に量子概念を結びつけ，原子には定常状態が存在して，それはとびとびの値（上の式の整数の値に対応している）のエネルギーしか許されず，原子から出てくるスペクトルは，原子がある定常状態から他の定常状態に移るとき，そのエネルギーの差をエネルギーとして持つ，エネルギー量子に対応するとした．この Bohr の定常状態仮説を実験的に確かめたのが ≪Frank-Hertz≫ (1913) である．彼らの考えは，ガスの中を電子が通るとき，その電子のエネルギーを次第に高くすると，はじめのうちエネルギーがガスの原子を基底状態から次の励起状態へ移すのに足りなければ，電子はそのままのエネルギーでガスから出てくるが，励起状態に移せるだけのエネルギーがあれば，電子が原子と衝突してこの原子を励起し，電子のエネルギーが失われるから，かえって低いエネルギーの電子が出てくるであろうということである．こうして原子の領域でも量子概念が重要な役割を果すことがわかり，原子を扱う力学として前期量子論が形成されていった．この前期量子論の帰結の一つに方向量子化，つまり角運動量ベクトルがとびとびの方向しかとれないということがある．≪Stern-Gerlach≫ (1922) は，スリットを通した銀の原子線を，磁場の中を通して写真をとるとスリットの影が二つに分かれることを見出し，原子線がとびとびの方向に曲げられること，つまり方向量子化を確立した．

かくして量子力学の夜明けが近づくのである．

〔参考文献〕

T. Young： “On the theory of light and colour”, *Philosophical Transactions of the Loyal Society of London*, **92**, 12—24 (1802).

M. Planck： “Über eine Verbesserung der Wienschen Spektralgleiching”, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, **2**, 202—204

(1900).
A. Einstein: "Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspinkt", ***Annalen der Physik*, 17**, 132—148 (1905).
A. H. Compton: "A quantum theory of the scattering of X-rays by light elements", ***Physical Review*, 21**, 483—502 (1923).
J. R. Rydberg: "On the structure of the line-spectra of the chemical elements", ***Philosophical Magazine*, 29**, 331—337 (1890).
W. Ritz: "On a new law of series spectra", ***Astrophysical Journal*, 28**, 237—243 (1908).
A. Einstein: "Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme", ***Annalen der Physik*, 22**, 180—190 (1907).
P. Debye: "Zur Theorie der spezifischen Wärme", ***Annalen der Physik*, 39**, 789—839 (1912).
J. Frank and G. Hertz: "Über Zusammenstöße zwischen Elektronen und den Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung desselben", ***Verhandhungen der Deutsche Physikalische Gesellschaft*, 16**, 457—467 (1914).
O. Stern and W. Gerlach: "Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld", ***Zeitschrift für Physik*, 9**, 349—355 (1922).

量子力学が出来上るまでの歴史については

朝永振一郎「量子力学 I, II」(みすず書房)

Max Jammer "The Conceptual Development of Quantum Mechanics" (McGraw-Hill, 1966).

が詳しい.

問題 I-2 [第2版, I-問2と同一]

Davisson-Germer および Thomson の実験と, 粒子の飛跡観測用の Wilson の霧箱の用法について簡単に述べよ.

〔※〕 **Davisson-Germer の実験について**

ニッケルの単結晶に電子線をあて, 散乱された電子線の強度の角度分布を測定すると, その特徴はニッケルに X 線を当てたときとよく似ている. つまり電子の波が規則正し

くならんだニッケルの原子に散乱され，それらの波が干渉すると見なせる．この考えにより電子線の波長を計算すると h/mv（(6.1)［〃］式）にかなりよく一致する．

G. P. Thomson の実験について

たいへん薄い膜に早い電子を当て，そのうしろで通過した電子を測定する．（膜を薄くしたのは，電子が通り抜けるとき膜の構成原子に二度以上散乱されないようにするためであり，また電子を早くするとその波長は硬 X-線の波長と同じ程度になり両方の実験を比較しやすいためである．）膜が無秩序にならんだ小さな結晶から成るときは，X線での Debye-Scherrer 法による結果とよく似た模様が得られ，結晶が規則正しく並んでいるときは，X線での Lane 写真によく似た模様が得られた．そして電子の "波長" を計算すると，Davisson-Germer の実験よりもよい精度で理論値（相対論の効果も入れて $h/mv\sqrt{1-v^2/c^2}$）に一致することがわかった．

Wilson の霧箱について

ピストンを底部につけたガラス製の円筒の中に水蒸気を飽和状態になるまでつめておき，急にピストンを下げて円筒の体積を膨張させると，中の水蒸気は過飽和状態となり，空気中のゴミやイオンを核として小さな水滴（霧）を作る．この過飽和状態のとき外から荷電粒子がこの箱に入ってくれば空気の原子と衝突してイオンを作り，これが核となって水滴を生じるから，この水滴の跡が荷電粒子の飛跡のごとく見える．

〔参考文献〕

C. T. R. Wilson: "On a method of making visible the paths of ionising particles through a gas", *Proc. Roy. Soc.*, **A85**, 285—288 (1911).

C. Davisson and L H. Germer: "Diffraction of electrons by a crystal of Nickels", *Phys. Rev.*, **30**, 705—740 (1927).

G. P. Thomson: "Experiments on the diffraction of cathode rays", *Proc. Roy. Soc.*, **A117**, 600—609 (1927).

問題 I-3　［第2版，I-問 3 と同一］

Stern-Gerlach の実験での銀の原子のビームは 1200°C の炉におかれた銀から蒸発する原子を集束してつくられる．ビームが1メートル走るものとして，不確定性原理を用いて検知器においてつくられうる最小のスポットの大きさはどの程度であるかを求めよ．

〔解〕 銀の原子の質量を m, コリメーターを出るときの速さを v, コリメーターの出口から壁までの距離を l とすると，不確定性関係による，壁でのひろがり s は

$$s=2\left(\Delta x+\frac{\Delta p}{m}\cdot\frac{l}{v}\right)$$

で与えられる．$\Delta x\cdot\Delta p=\alpha\hbar$ とすると

$$s=2\left(\Delta x+\frac{\alpha\hbar}{m}\frac{l}{v}\frac{1}{\Delta x}\right)$$

$$\geq 4\times\sqrt{\alpha}\cdot\sqrt{\frac{\hbar}{m}\frac{l}{v}}\equiv s_{min}.$$

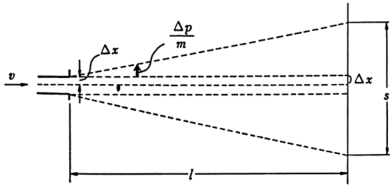


図　1

銀の原子量は 107.9, 1原子質量単位のエネルギーは 931.5 Mev であるから

$$mc^2=107.9\times 931.5\ \text{Mev}.$$

また 1 eV に付随する温度は 11,600°K であるから

$$\frac{1}{2}mv^2=\frac{3}{2}\times\frac{1,200+273}{11,600}\text{eV}.$$

$c=3.0\times 10^{10}$cm/sec.　1eV$=1,602\times 10^{-12}$erg を用いると

$$\sqrt{\frac{\hbar l}{mv}}=\frac{\sqrt{1.054\times 10^{-27}\times 100}}{\sqrt[4]{3\times\frac{1473}{11600}\times 107.9\times 931.5\times 10^6\times\left(\frac{1.602\times 10^{-12}}{3.0\times 10^{10}}\right)^2}}\simeq 1\times 10^{-4}\ \text{cm}$$

を得る．したがって (3.1) [〃] より $\alpha=1$ とすると

$$s_{min}\simeq 4\times 10^{-4}\ \text{cm}.$$

また (12.7) [〃] より $\alpha=1/2$ とすると

$$s_{min}\simeq 3\times 10^{-4}\ \text{cm}.$$

問題 I－4　［第2版，I-問5と同一］

1オンスの小銃弾が標的に達するのに0.5秒かかるとする．弾丸を質点とみなし，かつ空気抵抗および地球の運動を無視し，射撃の際のねらいおよび発射は最上の条件で行なわれるとして，標的での連続的な射撃点の拡りの大きさがどの程度になるかを求めよ．

〔解〕 弾丸の到着点でのひろがり s は

$$s=2(\Delta x+d).$$

弾丸の質量を m, 標的に届くまでの時間を t とすると

$$d=\frac{\Delta p}{m}t.$$

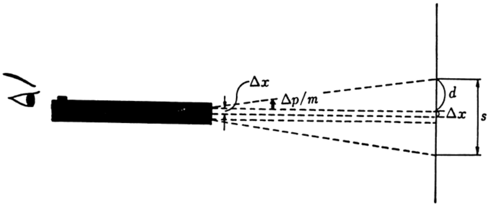


図 2

$\Delta x\cdot\Delta p=\alpha\hbar$ とすると

$$s=2\left(\Delta x+\frac{\Delta p}{m}t\right)=2\left(\Delta x+\frac{\alpha\hbar}{m}\frac{t}{\Delta x}\right)\geq 4\times\sqrt{\alpha}\sqrt{\frac{\hbar t}{m}}=s_{min}.$$

1 ounce＝28.35 gram であるから

$$\sqrt{\frac{\hbar t}{m}}=\sqrt{\frac{1.054\times10^{-27}\times0.5}{28.35}}\simeq4.3\times10^{-15}\,\text{cm}.$$

(3.1) [〃] により $\alpha=1$ ととると

$$s_{min}\simeq1.7\times10^{-14}\,\text{cm}.$$

また (12.7) [〃] により $\alpha=1/2$ ととると

$$s_{min}\simeq1.2\times10^{-14}\,\text{cm}.$$

〔注意〕 重力の影響は到着点でのひろがりを全体として $gt^2/2\simeq12.3\,\text{cm}$ 下げるだけである.

問題 I - 5　〔第2版, I-問6と同一〕

真空中で完全に弾性的なピンポン玉を固定された同半径の完全に弾性的な球に対し, 半径の10倍の高さから落したとする. 地球の運動の効果を無視し, かつピンポン玉が最適の条件ではなされるものとして, この玉が固定球に対してその上で行ないうると期待されるはずみの最大回数を算定せよ.

〔解〕 *)ピンポン玉の半径を r, 質量を m とする. 重心の運動に着目すれば, 半径$2r(\equiv a)$ の固定された剛体球に質量 m の質点が高さ $10r(\equiv H)$ から落下する問題と同等である.

古典力学的に考えれば下の球面の頂点に真上から質点を自由落下させれば何回でもはずむことになるが, 量子力学的に考えれば, この質点を頂点から真上にある小さい領域

*) この解法は吉田俊博氏 (福島大学教育学部助教授) による.

に閉じ込めようとすれば，不確定性関係から水平向きの運動量が大きくなって，頂点から離れたところに落ちるであろうし，水平向きの運動量を小さくしようとすると質点は小さい領域には閉じこめられなくなる．問題は，この水平向きの位置の不確定 Δx と運動量の不確定 Δp $(\Delta x\cdot\Delta p\geq\hbar)$とをうまく調節して，なるべく多くの回数球面ではずむようにしようということである．

まず予備の計算として，球面の頂点からどのくらい離れたところに，質点が垂直に落ちれば，再び球面ではずむことはないかを調べる．下図のように座標系をとり，質点が高さ H より，重力の作用の下に自由落下して $x=a\sin\theta$，$y=a\cos\theta$ の点に垂直に落ちたとする．球面に衝突するまでの時間 T は

$$T=\sqrt{\frac{2(H-a\cos\theta)}{g}}.$$

はねかえされたときの速度 v は

$$\begin{cases} v_x=gT\sin2\theta, \\ v_y=gT\cos2\theta \end{cases}$$

であるから，はねかえされてから時刻 t の後の質点の位置は

$$\begin{cases} x=a\sin\theta+v_xt, \\ y=-gt^2/2+v_yt+a\cos\theta. \end{cases}$$

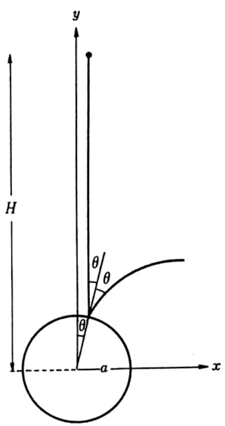


図　3

したがって質点の描く放物線は

$$y=-\frac{1}{4}\frac{1}{H-a\cos\theta}\times\left(\frac{x-a\sin\theta}{\sin2\theta}\right)^2+\frac{\cos2\theta}{\sin2\theta}(x-a\sin\theta)+a\cos\theta. \quad (1)$$

はね返された質点が再び球面にもどってこない条件は，（１）式の右辺に $x=a$ と入れたとき正になることである：

$$-\frac{1}{4}\frac{a}{H-a\cos\theta}(1-\sin\theta)^2+\sin2\theta\cos2\theta(1-\sin\theta)+\sin^22\theta\cos\theta\geq0. \quad (2)$$

相当高いところから（$H=5a$）落ちているから，θ が小さくても上の不等号が満たされると予想し，まず（２）式で等号を成り立たせる θ を１に比べて θ^2 を無視して計算すると

$$-\frac{1}{4}\ \frac{a}{H-a}(1-2\theta)+2\theta=0$$

となり

$$\theta=\frac{1}{8(H-a)/a+2}=\frac{1}{34}$$

を得る．つまり θ が 1/34（2° 足らず）以上のところへ落ちれば，再び球面にもどることはないわけである．

本題に入る．我々は初期条件として，高さHの水平面内で球面の頂点（の垂直線）を中心として，位置の不確定 $\overrightarrow{\Delta x}$ と運動量の不確定 $\overrightarrow{\Delta p}$ とを持っているが，我々が制御できるのは（3.1）[〃] あるいは（12.7）[〃] を満たす範囲で不確定さの大きさを指定することであり，$\overrightarrow{\Delta x}$ と $\overrightarrow{\Delta p}$ との方向は制御できない．したがって最悪の場合を予想して $\overrightarrow{\Delta x}$ と $\overrightarrow{\Delta p}$ の方向が一致するときを考察する．（最悪の事態でも　うまく制御してどれだけ多くの回数ピンポン玉をはずませることができるかということ．）球面の頂点を通る一垂直面内で考えればよいから，先ほどと同じように座標系をとる．初速度 $(\Delta p/m, 0)$ で位置（Δx, H）より重力の作用の下で（$a\sin\theta_0$, $a\cos\theta_0$）の点に時間 t_0 かゝって落下したとすると

$$\begin{cases} a\sin\theta_0=\Delta x+\dfrac{\Delta p}{m}t_0, \\ H-a\cos\theta_0=\dfrac{1}{2}gt_0^2. \end{cases} \tag{3}$$

球面にあたったときの速度は $\boldsymbol{v}_0=(\Delta p/m, -gt_0)$.
次にはね上るときの速度 $\boldsymbol{u}_1$ は

$$\tan\varphi_0=\frac{\Delta p/m}{gt_0} \tag{4}$$

とおくと

$$\begin{cases} u_{1x}=|\boldsymbol{v}_0|\sin(2\theta_0+\varphi_0), \\ u_{1y}=|\boldsymbol{v}_0|\cos(2\theta_0+\varphi_0). \end{cases} \tag{5}$$

はね上って次に球面に落ちてくるまでの時間を t_1, そのときの位置を $(a\sin\theta_1, a\cos\theta_1)$，速度を $\boldsymbol{v}_1$ とすると

$$\begin{cases} (a\sin\theta_1-a\sin\theta_0)=u_{1x}t_1, \\ (a\cos\theta_1-a\cos\theta_0)=u_{1y}t_1-gt_1^2/2. \end{cases}$$

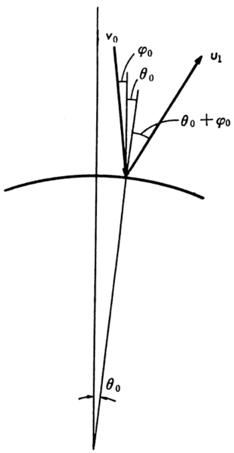


図　4

$$\begin{cases} v_{1x}=u_{1x}, & \text{（水平方向の運動量の保存）} \\ v_{1y}{}^2+2ga\cos\theta_1=u_{1y}{}^2+2ga\cos\theta_0. & \text{（エネルギーの保存）} \end{cases}$$

これが再びはね返るときの速度 $\boldsymbol{u}_2$ は

$$\tan\varphi_1=v_{1x}/|v_{1y}|$$

とおくと

$$\begin{cases} u_{2x}=|\boldsymbol{v}_1|\sin(2\theta_1+\varphi_1), \\ u_{2y}=|\boldsymbol{v}_1|\cos(2\theta_1+\varphi_1). \end{cases}$$

一般に i 回目にはずんだときの位置を $(a\sin\theta_{i-1},\ a\cos\theta_{i-1})$，速度を $\boldsymbol{u}_i$ とし，これが時間 t_i 後に位置 $(a\sin\theta_i,\ a\cos\theta_i)$ へ速度 $\boldsymbol{v}_i$ で落ちてきて速度 $\boldsymbol{u}_{i+1}$ ではずむとすると

$$\begin{cases} a(\sin\theta_i-\sin\theta_{i-1})=u_{ix}t_i, \\ a(\cos\theta_i-\cos\theta_{i-1})=u_{iy}t_i-gt_i{}^2/2. \end{cases} \tag{6}$$

$$\begin{cases} v_{ix}=u_{ix}, \\ v_{iy}{}^2=u_{iy}{}^2+2ga(\cos\theta_{i-1}-\cos\theta_i). \end{cases} \tag{7}$$

$$\begin{cases} u_{i+1,x}=|\boldsymbol{v}_i|\sin(2\theta_i+\varphi_i), \\ u_{i+1,y}=|\boldsymbol{v}_i|\cos(2\theta_i+\varphi_i) \end{cases} \quad \tan\varphi_i=v_{ix}/|v_{iy}|, \tag{8}$$

が成り立つ．ここで予備の計算を考慮しつつ近似を行なう．θ_i は大体1/34を越えると再び球面にはねかえることはないから，θ_i は小さいとして1に比べて $\theta_i{}^2$ の項を無視する．また φ_i も小さいと考えられるから同じ近似を行なう．この近似の下で（3），（4），（5）はそれぞれ

$$\begin{cases} a\theta_0=\Delta x+(\Delta p/m)t_0, \\ H-a=\frac{1}{2}gt_0^2. \end{cases} \tag{3$'$}$$

$$\varphi_0=(\Delta p/m)/gt_0. \tag{4$'$}$$

$$\begin{cases} u_{1x}=gt_0(2\theta_0+\varphi_0), \\ u_{1y}=gt_0 \end{cases} \tag{5$'$}$$

となる．(3)′，(4)′ より

$$\begin{cases} \theta_0=\dfrac{\Delta x}{a}+\dfrac{\Delta p}{m}\cdot\sqrt{\dfrac{2(H-a)}{a}}\,\dfrac{1}{\sqrt{ag}}, \\ \varphi_0=\dfrac{\Delta p/m}{\sqrt{ag}\,\sqrt{2(H-a)/a}} \end{cases} \tag{9}$$

を得る．また（6），（7），（8）はそれぞれ

$$\begin{cases} a(\theta_i-\theta_{i-1})=u_{ix}t_i, \\ \quad 0 \quad =u_{iy}t_i-gt_i^2/2. \end{cases} \tag{6$'$}$$

$$\begin{cases} v_{ix}=u_{ix}, \\ |v_{iy}|=u_{iy}. \end{cases} \tag{7$'$}$$

$$\begin{cases} u_{i+1,x}=|v_{iy}|(2\theta_i+\varphi_i), \\ u_{i+1,y}=|v_{iy}| \end{cases} \qquad \varphi_i=v_{ix}/|v_{iy}|, \tag{8$'$}$$

となる．これより

$$u_{i+1,y}=|v_{iy}|=u_{i,y}=\cdots\cdots=u_{1,y}=gt_0$$

を得るから

$$t_i=2t_0,\quad u_{ix}=gt_0\varphi_i$$

となり，(6)′ の上式と (8)′ の二式の比をとることにより

$$\begin{cases} \theta_i-\theta_{i-1}=\dfrac{4(H-a)}{a}\varphi_i, \\ \varphi_{i+1}-\varphi_i=2\theta_i \end{cases} \tag{10}$$

を得る．

$$\frac{4(H-a)}{a}=A(=16)$$

とおくと（9）は

$$\begin{cases} \theta_0=\dfrac{\Delta x}{a}+\dfrac{1}{\sqrt{2}}\dfrac{1}{m\sqrt{ag}}\sqrt{A}\,\Delta p, \\ \varphi_0=\sqrt{2}\times\dfrac{1}{m\sqrt{ag}}\dfrac{1}{\sqrt{A}}\Delta p \end{cases} \tag{9$'$}$$

となり（10）は

$$\begin{cases} \theta_i-\theta_{i-1}=A\varphi_i, \\ \varphi_{i+1}-\varphi_i=2\theta_i \end{cases} \tag{10$'$}$$

となる．(10)′ は初等的に解くことができて

$$B=A+1+\sqrt{(A+1)^2-1}=33.97\simeq 34$$

とおくと

$$\begin{cases} \theta_i=\dfrac{1}{B+1}\dfrac{B^{2i+1}+1}{B^i}\theta_0+\dfrac{1}{2}\dfrac{B-1}{B+1}\dfrac{B^{2i}-1}{B^i}\varphi_0, \qquad (i=1,2,\cdots) \\ \varphi_i=\dfrac{2B}{B^2-1}\cdot\left[\dfrac{B^{2i}-1}{B^i}\theta_0+\dfrac{1}{2}(B-1)\cdot\dfrac{B^{2i-1}+1}{B^i}\varphi_0\right] \quad (i=1,2,\cdots) \end{cases} \tag{11}$$

を得る．

まず求める回数の大きさを大体知るため，さらに近似して1に比べて $1/B$ $(\simeq 0.03)$ を無視すると（11）より

$$\theta_i = B^i(\theta_0 + \varphi_0/2),$$
$$\varphi_i = 2B^{i-1}(\theta_0 + \varphi_0/2)$$

となり，この近似の下では θ_i に比べて φ_i を無視してよいから，予備計算での垂直に落ちる場合の考えがそのままあてはまり，θ_i が $1/34 \sim 1/B$ を越えると次は，はずまないから

$$B^i(\theta_0 + \varphi_0/2) = 1/B \tag{12}$$

となる．i（必ずしも整数でない）を求めると回数の目安を得る．なるべく i を大きくするためには $\theta_0+\varphi_0/2$ が小さいほどよく（9)′ より

$$\theta_0 + \frac{\varphi_0}{2} = \frac{\Delta x}{a} + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{m\sqrt{ag}}\left(\sqrt{A} + \frac{1}{\sqrt{A}}\right)\Delta p$$
$$\geq 2\sqrt{\frac{1}{a}\frac{1}{\sqrt{2}\,m\sqrt{ag}}\left(\sqrt{A} + \frac{1}{\sqrt{A}}\right)}\sqrt{\Delta x \cdot \Delta p}$$
$$\geq \alpha^{\frac{1}{2}}\frac{\sqrt{17}}{2}m^{-\frac{1}{2}}r^{-\frac{3}{4}}\hbar^{\frac{1}{2}}g^{-\frac{1}{4}} \equiv \beta$$

を得る．ここで不確定性関係 $\Delta x \cdot \Delta p \geq \alpha\hbar$ を用いた．$\theta_0+\varphi_0/2$ の最小値 β を用いて（12）を解くと，すべての物理量を c.g.s. 単位系で表わして

$$i + 1 = 9.09 + 0.33\log m + 0.49\log r - 0.33\log\alpha$$

を得る（対数の底は 10)．ピンポン玉を硬球とすると $m=2.5$, $r=1.9$ ぐらいで α は（3.1）[〃] からは 1,（12.7）[〃] からは1/2であるが，それにはあまり関係なく $\theta_8 < 1/B < \theta_9$ が出るから，不確定性関係の α を1の程度になるように初期条件を調節すれば10回はずませることができる．

近似を上げて $1/B$ の程度を考慮しても，結論には変わりないであろうから，ここではその計算を省略する．

問題Ｉ－6　［第2版，Ｉ-問7と同一］

Frank-Herz の実験では，ある原子の特定の準位を励起するために単一のエネルギーの電子のビームが用いられる．もしもこの準位が基底状態へおち

る輻射によって短い寿命しかもたないものであれば，励起状態をつくるためにエネルギーを失って非弾性的に散乱される電子は，すべてそろって同じ最終エネルギーをもつとは期待されないはずであることを示せ．もしも励起準位が大体 10^{-10} 秒持続するものとすれば，電子のエネルギーの拡りの大きさは電子ボルトで測ってどの程度になるかを求めよ．

〔**解**〕 最初電子が E_e のエネルギーをもって，あるエネルギーレベル E_0 の原子を励起してエネルギーレベル E_1 に上げたとすると，散乱された電子のエネルギー E は

$$E=E_0+E_e-E_1$$

で与えられる．ところがエネルギー E_1 の励起状態が不安定で時間 Δt しか続かないとすると，不確定性関係

$$\Delta E_1\cdot\Delta t\gtrsim\hbar$$

により，E_1 には $\Delta E_1\gtrsim\hbar/\Delta t$ 程度の不確定が生ずる．したがって散乱された電子のエネルギーにも同じ大きさの不確定が生じ $\Delta t\simeq10^{-10}\,\mathrm{sec}$ とすると

$$\frac{\hbar}{\Delta t}\simeq7\times10^{-6}\,\mathrm{eV}$$

の程度である．

問題 I - 7　［第2版，I-問8と同一］

三つの不確定性関係 (3.1)［〃］，(3.2)［〃］，(3.3)［〃］の間に何等かの関連があるかを考え，議論せよ．

〔※〕 位置と運動量との不確定性関係 (3.1)［〃］を出発点にとり，この式から“古典的”な考えによって角度と角運動量との不確定性関係 (3.2)［〃］を導く．半径 a の円周上に拘束されている“粒子”を考える．この粒子の位置の不確定さ Δx は原点まわりの角度の不確定さ $\Delta\phi$ と $\Delta x=a\Delta\phi$ の関係にある．また原点まわりの角運動量 J_z は，この粒子の運動量 p_x と $J_z=ap_x$ の関係（古典力学的関係）で結ばれるから，原点まわりの角運動量の不確定さ ΔJ_z と，この粒子の運動量の不確定さ Δp_x とは $\Delta J_z=a\Delta p_x$ で結ばれている．したがって

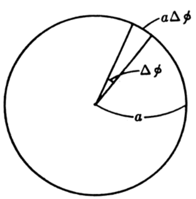


図　5

$$\Delta\phi\cdot\Delta J_z=(\Delta x/a)\cdot a\Delta p_x=\Delta x\cdot\Delta p_x\gtrsim\hbar$$

となり (3.2) [〃] が導かれた．さらに時間とエネルギーとの不確定性関係を同様な考えにより導く．この粒子が "大体" 角速度 ω でこの円周上をまわっているとすると，ある時刻から t の後には角度 $\phi=\omega t$ だけ回転していると予想されるが，その角度の不確定さのため t の測定には $\Delta t=\Delta\phi/\omega$ の不確定さを生ずる．一方この粒子のエネルギー E は大体 $E=ma^2\omega^2/2$ で与えられるが，角運動量 $J_z=a^2m\omega$ の不確定さ $\Delta J_z=a^2m\Delta\omega$ のため $\Delta E=ma^2\omega\Delta\omega=\omega\cdot\Delta J_z$ の不確定さが生じ，結局

$$\Delta t\cdot\Delta E=(\Delta\phi/\omega)\cdot\omega\Delta J_z=\Delta\phi\cdot\Delta J_z\gtrsim\hbar$$

となり (3.3) [〃] が導かれた．あるいは (3.3) [〃] は (3.1) [〃] から，v の速度で走っている粒子による時間の測定を考えることにより，直接導くこともできる．(Bohm の教科書参照) したがって三つの不確定性関係には半古典的に考えて関連がある．

(3.1) [〃] については量子力学のわく内ではっきりした意味付けを与えられるが ((12.7) [〃] 式)，他の二つについては問題点がある．(3.2) [〃] については $\Delta\phi\leq2\pi$ であり，かつ ΔJ_z をいくらでも小さくできるから (3.2) [〃] は成り立たないといったパラドクスめいた議論があり，また (3.3) [〃] については，量子力学において t は観測量ではなくてパラメーターとして入ってきているから，その不確定さといっても意味がない．したがって Δt の解釈が問題となり，たとえば 問題 I-6 では Δt はエネルギーを測定するのに費やされる時間間隔となっている．また多粒子系では (3.1) [〃] はその各々の粒子の位置と運動量に対して成り立つが，(3.3) [〃] の ΔE は全エネルギーの不確定さと解釈すべきである．

問題 I-8　[第2版，I-問9と同一]

(5.6) [〃] の方程式の左辺にあらわれている群速度の表式を導け．

〔**解**〕 振動数 ν が波長 λ の関数であるような波

$$\exp\left[2\pi i\left(\frac{1}{\lambda}x-\nu\left(\frac{1}{\lambda}\right)t\right)\right]$$

を考える．$1/\lambda=\kappa$ とおき $\kappa=\kappa_0$ の波と $\kappa=\kappa_0+\Delta\kappa$ の波とを同じ重みで重ね合わせると ($\Delta\kappa$ 小)

$$\exp[2\pi i(\kappa_0x-\nu(\kappa_0)t)]+\exp[2\pi i\{(\kappa_0+\Delta\kappa)x-(\nu(\kappa_0)+\nu'(\kappa_0)\Delta\kappa)t\}]=$$

$$=\exp[2\pi i(\kappa_0 x-\nu(\kappa_0)t)]\{1+\exp[2\pi i\Delta\kappa(x-\nu'(\kappa_0)t)]\}$$

となる．この波束の中心は振巾の一番大きいところである．上式で前の因子は絶対値が1であるから振巾には関係なく，後の因子の絶対値が最大になるところは

$$x=\nu'(\kappa_0)t$$

である．したがって波束の中心は

$$\frac{dx}{dt}=\nu'(\kappa_0)=\left.\frac{d\nu}{d(1/\lambda)}\right|_{\lambda=1/\kappa_0}$$

の速度をもっている．これが群速度である．

今は波長が少し異なっている二つの波を同じ重みで加え合わせたが，波長について重み f で積分しても 結果は変わらない． ただし重み f は波長のなめらかな 関数で，ある値($\lambda=1/\kappa_0$) に峰を持つものとする．

第 Ⅱ 章

Schrödinger の波動方程式

問題Ⅱ-1　〔第2版，Ⅱ-問1と同一〕

§6の議論を使って自由粒子の場合で，ψの微分方程式の内，時間に関する二階の微係数を含んでいるものをつくれ．この方程式の解のうち自由粒子に対する Schrödinger 方程式の解と共通になっていないものについて論ぜよ．

〔※〕 自由粒子に対する Schrödinger 方程式 (6.11)［〃］は，古典的なエネルギーと運動量との関係式 (6.12)［〃］に対応関係 (6.13)［〃］を用いて得られたものと見なせる．したがって時間について二階の微分方程式を得るには

$$E^2=\frac{1}{4m^2}(\mathbf{p}^2)^2 \tag{1}$$

に対応関係 (6.13)［〃］を用いて

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar^4}{4m^2}(\nabla^2)^2\psi(\mathbf{r},t) \tag{2}$$

とすればよい．これと (6.11)［〃］との差は

1) 虚数単位 i があらわれていないから，波動関数ψが複素数値をとるにしても，実部と虚部とは分離して，それぞれ方程式（2）に従う．

2) 時間について二階であるから，初期値として $\psi(\mathbf{r},0)$ と $\psi_t(\mathbf{r},0)$ とを与えなければ解は一意的に定まらない．

2) から，ψ に対して確率解釈が成り立たないことが結論される．もし時刻 $t=0$ での ψ の“確率”密度 $P(\mathbf{r},t=0)$ が $\psi(\mathbf{r},0)$（およびその空間微分）のみで与えられ，$t=0$ での時間微分 $\psi_t(\mathbf{r},0)$ にはよらないとする．そしてこの“確率”密度の空間積分が，ψ が（2）にしたがって時間発展しても保存されるとする：

$$P(\mathbf{r},0)=P[\psi(\mathbf{r},0)]\ (\geq 0) \tag{3}$$

$$\int P(\mathbf{r},0)\,d^3r=\int P(\mathbf{r},t)d^3r\ (\equiv P[\psi]). \tag{4}$$

確率解釈が成り立つためには

$$P[\psi]\geqq 0, \quad (\text{等号が成り立つのは } \psi=0 \text{ のときだけ}) \tag{5}$$

も満たさねばならない．すると（3），（4），（5）より $\psi(\mathbf{r},0)$ が零なら $P[\psi]$ が零となり，$P[\psi]$ が時間によらないから $\psi(\mathbf{r},t)$ も零であることが結論される．（2）の線形性より，このことは初期値として $\psi(\mathbf{r},0)$ のみを与えれば，$\psi(\mathbf{r},t)$ は一意的に定まることを意味しているから 2) と矛盾する．したがって“確率”密度としては

$$P(\mathbf{r},0)=P[\psi(\mathbf{r},0),\ \psi_t(\mathbf{r},0)] \tag{6}$$ *)

という形をとらねばならない．波動関数の時間微分に“確率”密度が依存するということは，“確率”がその波動関数のあらわす粒子が持っているエネルギーに依存するということを意味しており，これではエネルギーの零点のとる具合によって“確率”が変わることになって不合理である（Bohm の教科書参照）．

※（追加 ⇨ 167p）

問題Ⅱ-2　［第2版，Ⅱ-問2と同一］

自由粒子に対する一次元の Schrödinger 波動方程式 (6.8)［〃］はガリレイ変換に対して不変であることを示せ．ただし，それには $x'=x-vt,\ t'=t$ なる変換を適用して，その際，変換された波動関数 $\psi'(x',t')=f(x,t)\psi(x,t)$ は，f が $x, t, \hbar, m$ および v のみを含む場合に変換された変数についての方程式 (6.8)［〃］を満たすことを示せばよい．また，f の形を求め，かつ伝播波の解 $\psi(x,t)=A\ \exp\ i(kx-\omega t)$ が期待される通りの変換をうけることを示せ．

〔解〕

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'(x',t')=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\psi'(x',t') \tag{1}$$

に $\psi'(x',t')=f(x,t)\psi(x,t)$, $\partial/\partial t'=\partial/\partial t+v\cdot\partial/\partial x$, $\partial/\partial x'=\partial/\partial x$ を代入して，$\psi(x,t)$ は (6.8)［〃］を満たすことに注意すると

---

*)　たとえば

$$P(\boldsymbol{r},t)=\left|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)\right|^2+\left|-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)\right|^2$$

ととればよい．

$$i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}f(x,t)+v\frac{\partial}{\partial x}f(x,t)\right)\psi(x,t)+i\hbar vf(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}f(x,t)\right)\psi(x,t)+2\left(\frac{\partial}{\partial x}f(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right)\right]$$

が得られ，$\psi(x,t)$ と $\partial\psi(x,t)/\partial x$ とは一次独立であるから，これより

$$\begin{cases}-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}f(x,t)=-mv\cdot f(x,t), & (2)\\ i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}f(x,t)=v\left(-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}\right)f(x,t)+\dfrac{1}{2m}\left(-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}\right)^2 f(x,t) & (3)\end{cases}$$

を得る.（2）を（3）に代入して

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(x,t)=-\frac{(mv)^2}{2m}f(x,t). \qquad (3)$$

(2)，(3)′ より f は

$$f(x,t)=C\exp\left[\frac{-i}{\hbar}\left(mvx-\frac{(mv)^2}{2m}t\right)\right], \qquad C：定数 \qquad (4)$$

と求まる．つまり方程式（6.8）は Galilei 変換 $x\to x'=x-vt,\ t\to t'=t$ に対して不変であり，その際波動関数は $\psi(x,t)\to\psi'(x',t')=f(x,t)\psi(x,t)$ と変換し，f は（4）で与えられる.

今波動関数 $\psi(x,t)$ が

$$\psi(x,t)=A\exp[i(kx-\omega t)]$$

で与えられるとき，変換された波動関数 $\psi'(x',t')$ は

$$\psi'(x',t')=AC\exp\left[i\left\{\left(k-\frac{mv}{\hbar}\right)x-\left(\omega-\frac{(mv)^2}{2m\hbar}\right)t\right\}\right]$$

となり，これはもとの波動関数から運動量が mv，エネルギーが $(mv)^2/2m$ だけ差引かれた状態を表わしている．Galilei 変換 $x'=x-vt, t'=t$ はもとの座標系に対して速度 v で走っている座標系から眺めるということだから，このことは物理的にもっともである.
※（追加 ⇨ 167p）

問題 II－3 ［第2版，II-問3と同一］

ψ が波束である場合，方程式（7.4）［〃］の体積積分 P および表面積分 S_n が収斂するためには，ψ は r の大きなところでどのように小さくなる必要があるか.

〔解〕

$$|\psi(\mathbf{r},t)|=O(r^{-a}),\qquad r\sim\infty$$

とすると

$$\int|\psi(\mathbf{r},t)|^2d^3r=\int_0^\infty r^2dr\int d\boldsymbol{\Omega}|\psi(r,t)|^2\qquad(d\boldsymbol{\Omega}\text{ は立体角面積要素})$$

が収束するためには

$$2-2a<-1\qquad\text{つまり}\qquad a>3/2$$

でなければならない．また（7.4）[〃]式で曲面 A を半径 R の球面にとると，$\psi(\mathbf{r},t)=\psi(r,\boldsymbol{\Omega};t)$ と記して，

$$\int_A S_n dA=R^2\int d\boldsymbol{\Omega}\left[\frac{\hbar}{2im}[\psi^*(R,\boldsymbol{\Omega};t)\frac{\partial}{\partial R}\psi(R,\boldsymbol{\Omega};t)\right.$$
$$\left.-\left(\frac{\partial}{\partial R}\psi^*(R,\boldsymbol{\Omega};t)\right)\psi(R,\boldsymbol{\Omega};t)]\right]$$

となるから，$R\to\infty$ としたとき収束するためには

$$\left|\frac{\partial}{\partial r}\psi(r,\boldsymbol{\Omega};t)\right|=O(r^{-b}),\qquad r\sim\infty$$

とすると

$$b\geq 2-a$$

であればよい．

問題 II-4　[第2版，II-問4と同一]

波束について，$\langle p_x\rangle$ が実数であることを直接示せ．

〔解〕 波束を $\psi(x,y,z;t)$ とする．部分積分を用いて

$$\langle p_x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dy\int_{-\infty}^{+\infty}dz\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\psi^*(x,y,z;t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,y,z;t)$$
$$=-i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{-\infty}^{\infty}dz|\psi(x,y,z;t)|^2\Big|_{x=-\infty}^{x=\infty}$$
$$+\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{-\infty}^{\infty}dz\int_{-\infty}^{\infty}dx\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,y,z;t)\right)\psi(x,y,z;t).$$

ψ が波束をあらわしていることより

$$\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{-\infty}^{\infty}dz\int_{-\infty}^{\infty}dx|\psi(x,y,z)|^2<+\infty$$

であるから，上式の右辺第一項は零となり，結局

$$\langle p_x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{-\infty}^{\infty}dz\int_{-\infty}^{\infty}dx\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,y,z\,;t)\right)\psi(x,y,z\,;t)$$

$$=\left(\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{-\infty}^{\infty}dz\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\psi^*(x,y,z\,;t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,y,z\,;t)\right)^*$$

$$=\langle p_x\rangle^*$$

となり，$\langle p_x\rangle$ は実数であることがわかる．

問題 II-5　［第2版，II-問5と同一］

三次元の波束について $\dfrac{d}{dt}\langle x^2\rangle=\dfrac{1}{m}(\langle xp_x\rangle+\langle p_xx\rangle)$ であることを示せ．

〔解〕 (7.9)［〃］を導くときと同じ議論で

$$\frac{d}{dt}\langle x^2\rangle=\frac{i\hbar}{2m}\int\psi^*[x^2\nabla^2\psi-\nabla^2(x^2\psi)]d^3r$$

を得る．

$$\nabla^2(x^2\psi)=\frac{\partial}{\partial x}(2x\psi)+2x\frac{\partial}{\partial x}\psi+x^2\nabla^2\psi$$

であるから

$$\frac{d}{dt}\langle x^2\rangle=\frac{i\hbar}{2m}\int\psi^*\left[-\frac{\partial}{\partial x}(2x\psi)-2x\frac{\partial}{\partial x}\psi\right]d^3r$$

$$=\frac{1}{m}\int\psi^*\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)(x\psi)+x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\right]=\frac{1}{m}(\langle xp_x\rangle+\langle p_xx\rangle).$$

問題 II-6　［第2版，II-問6と同一］

ポテンシャルが第7図 b［〃］の形をしているとき，$V_0a^2=6\hbar^2/m$ としてエネルギー準位を計算し，そのときの三つの束縛状態の固有関数の形を描け．そして，これを第7図 a［〃］のポテンシャルの最初の三つの状態と比較せよ．

〔解〕 第8図［〃］および第9図［〃］より，$V_0a^2=12\times\hbar^2/2m$ に対しては束縛状態は三つ存在することがわかる．エネルギーの低いものから

① $\eta=\xi\tan\xi$ と $\xi^2+\eta^2=12$ との $0<\xi<\pi/2$ での交点，$\eta=\eta_1,\xi=\xi_1$,

② $\eta=-\xi\cot\xi$ と $\xi^2+\eta^2=12$ との $\pi/2<\xi<\pi$ での交点，$\eta=\eta_2,\xi=\xi_2$,

③ $\eta=\xi\tan\xi$ と $\xi^2+\eta^2=12$ との $\pi<\xi<3\pi/2$ での交点，$\eta=\eta_3,\xi=\xi_3$,

に対応している．

① 数値計算より $\eta_1=3.24$, $\xi_1=1.21$ と出るからエネルギーレベル E_1 は

$$E_1=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\xi_1{}^2}{a^2}=1.47\times\frac{\hbar^2}{2ma^2}=0.596\times\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}.$$

また波動関数 $u_1(x)$ は

$$\begin{cases} u_1(x)=B_1\cos\alpha x=B_1\cos(1.21x/a) & :|x/a|<1, \\ u_1(x)=C_1e^{-\beta|x|}=C_1e^{-3.24|x/a|} & :|x/a|>1. \end{cases}$$

ただし

$$B_1\cos 1.21=C_1e^{-3.24} \quad つまり \quad 0.35B_1=0.039C_1.$$

② $\eta_2=2.51$, $\xi_2=2.38$ であるから

$$E_2=5.68\times\frac{\hbar^2}{2ma^2}=2.30\times\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2},$$

$$\begin{cases} u_2(x)=A_2\sin(2.38x/a) & :|x/a|<1, \\ u_2(x)=\pm C_2e^{\mp 2.51x/a} & :\pm x/a>1. \end{cases}$$

ただし

$$0.69A_2=0.081C_2$$

③ $\eta_3=0.79$, $\xi_3=3.37$ であるから

$$E_3=11.37\times\frac{\hbar^2}{2ma^2}=4.61\times\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2},$$

$$\begin{cases} u_3(x)=B_3\cos(3.37x/a) & :|x/a|<1, \\ u_3(x)=C_3e^{-0.79|x/a|} & :|x/a|>1. \end{cases}$$

ただし

$$-0.97B_3=0.45C_3.$$

$V_0\to+\infty$ での最初の三つの解は

① $\tilde{E}_1=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$, $\tilde{u}_1(x)=\tilde{B}_1\cos\dfrac{\pi}{2}\dfrac{x}{a}$, $\left|\dfrac{x}{a}\right|\leq 1.$

② $\tilde{E}_2=4\times\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$, $\tilde{u}_2(x)=\tilde{A}_2\sin\pi\dfrac{x}{a}$, $\left|\dfrac{x}{a}\right|\leq 1.$

③ $\tilde{E}_3=9\times\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$, $\tilde{u}_3(x)=\tilde{B}_3\cos\dfrac{3\pi}{2}\dfrac{x}{a}$, $\left|\dfrac{x}{a}\right|\leq 1.$

両者を比較して図示すると：

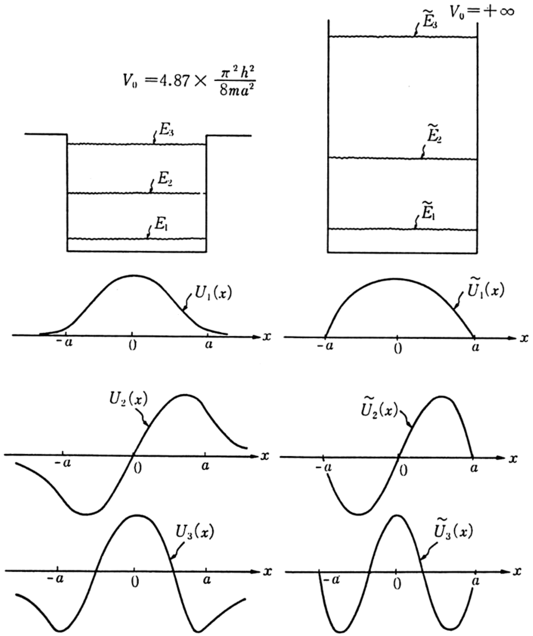


図　6

問題Ⅱ-7　［第2版，Ⅱ-問7と同一］

第7図 b ［〃］のポテンシャルのエネルギー準位とポテンシャル； $V(x)=+\infty$, $x<0$；$V(x)=0$, $0<x<a$；$V(x)=V_0$, $x>a$ に対するエネルギー準位との間の関係を論ぜよ．

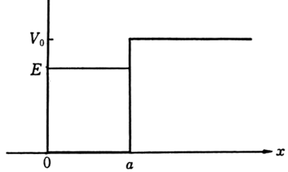


図　7

〔**解**〕 このポテンシャルによる束縛状態に対する Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}=Eu\quad 0<x<a\quad (E>0) \tag{1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+V_0u=Eu \quad x>a \quad (V_0>E) \tag{2}$$

となる．

$\alpha=[2mE/\hbar^2]^{1/2}$ とおくと（1）より

$$u_{in}(x)=A\sin\alpha x+B\cos\alpha x, \quad 0<x<a. \tag{3}$$

また $\beta=[2m(V_0-E)/\hbar^2]^{1/2}$ とおくと（2）より

$$u_{out}(x)=Ce^{-\beta x}+De^{\beta x}, \quad x>a. \tag{4}$$

境界条件は

$$u_{in}(0)=0, \quad lim_{x\to+\infty}u_{out}(x)=0, \tag{5}$$

$$u_{in}'(a)/u_{in}(a)=u_{out}'(a)/u_{out}(a). \tag{6}$$

（5）より

$$B=0, \quad D=0,$$

（6）より

$$\alpha\cot\alpha a=-\beta$$

を得る．このエネルギーレベルに対する固有方程式は第9図［〃］に与えられたものと一致する．つまり第7図［〃］で与えられるポテンシャルの束縛状態のエネルギーレベルのうち，その波動関数のパリティが奇であるエネルギーレベルが，この問題のエネルギーレベルと一致する．

問題Ⅱ-8　〔第2版，Ⅱ-問8と同一〕

いたるところでポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{r})$ を定数だけ変化させても，時間を含まない波動関数は変わらないことを示せ．また，そのとき，エネルギーの固有関数はどうなるか？

〔解〕 (8.1)［〃］から (8.2)［〃］, (8.3)［〃］を導くのと同じ議論で Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\mathbf{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})+V_0\right]\varphi(\mathbf{r},t)$$

で $\varphi(\mathbf{r},t)=v(\mathbf{r})g(t)$ と変数分離すると

$$\frac{i\hbar}{g}\frac{dg}{dt}=\frac{1}{v}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})+V_0\right]v$$

を得る．分離定数を $E+V_0$ とおくと

$$g(t)=Ce^{-i(E+V_0)t/\hbar}$$

となり，時間に依らない波動関数 v に対する方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]v(\mathbf{r})=Ev(\mathbf{r})$$

となる．これは (8.2) と同じである．しかし $g(t)$ は $f(t)$ と異なっていて，エネルギーレベルが V_0 だけ変化している．

第 III 章

固有関数と固有値

問題III-1　[第2版，III-問1と同一]

一次独立ではあるが，必ずしも直交していない三つの縮退した固有関数が与えられている場合，それらの一次結合のうちから互いに直交し，かつ規格化されているものを求めよ．この新しい三つの一次結合は固有関数になっているか？　もしそうなら，それらは縮退しているか？

〔**解**〕　演算子 Ω の互いに縮退した三つの固有関数を u_1, u_2, u_3 とする．したがって

$$\Omega u_j = \omega u_j, \quad (j=1,2,3)$$

である．まず u_1 を規格化したものを v_1 とすると

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{(u_1, u_1)}} u_1, \quad (v_1, v_1) = 1$$

が成り立つ．ただし (u, v) は，内積 $\int u^*(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d^3r$ を表わすものとする．

さらにこの v_1 と u_2 から

$$u_2' = u_2 - (v_1, u_2) v_1$$

を作ると

$$\begin{aligned}(v_1, u_2') &= (v_1, u_2) - (v_1, u_2)(v_1, v_1) \\ &= (v_1, u_2) - (v_1, u_2) \\ &= 0\end{aligned}$$

であるから．u_2' は v_1 に直交することがわかる．これを規格化したものを v_2 とする．

$$v_2 = \frac{1}{\sqrt{(u_2', u_2')}} u_2', \quad (v_2, v_2) = 1$$

同様にして

$$u_3' = u_3 - (v_1, u_3) v_1 - (v_2, u_3) v_2$$

を規格化して得られる関数

$$v_3 = \frac{1}{\sqrt{(u_3', u_3')}} u_3', \quad (v_3, v_3) = 1$$

は v_1, v_2 に直交している．こうして得られた v_1, v_2, v_3 は互いに規格化されているが，いずれも u_1, u_2, u_3 の一次結合だから

$$\Omega v_j=\omega v_j, \quad (j=1,2,3)$$

が成立するので Ω の固有関数であり，縮退はなくならない．このようにして互いに直交し規格化された解を求めるのを Schmidt の直交化法という．

なお，いま n 個の規格直交化された関数 u_j $(j=1,2,\cdots\cdots,n)$ と任意の関数 ψ が与えられていて，(u_j,ψ) のすべてが 0 となることはないものとすると，上の方法を使って u_j のすべてに直交する関数を作ることができる．すなわち

$$u=\psi-\sum_{j=1}^{n}(u_j,\psi)u_j$$

で定義される u は u_j のすべてに直交する．あと u を規格化すれば結局 u_j $(j=1,2,\cdots,n)$ と ψ から規格直交化された $(n+1)$ 個の関数が得られたことになる．

問題III－2 〔第2版，III-問2と同一〕

粒子の一次元の運動に関する限りでは，すべての実数 x' に対して関数 $u_{x'}(x)=\delta(x-x')$ は一つの完全規格化直交系をつくり，またこの関数の各々は位置変数 x の固有関数でその固有値は x' であるということを示せ．さらにこれから位置の確率関数をつくり，§7 で得られたものと比較せよ．

〔**解**〕 $u_{x'}(x)=\delta(x-x')$ とすると (11.13)［〃］の最後の二式を使うと，

$$xu_{x'}(x)=x\delta(x-x')=x'\delta(x-x')=x'u_{x'}(x)$$

$$\int u_{x'}^*(x)u_{x''}(x)\,dx=\int\delta(x-x')\delta(x-x'')dx=\delta(x'-x'')$$

が得られるので，$u_{x'}(x)$ は演算子 x の固有値 x' に属する固有関数である．逆に $u_{x'}(x)$ が，

$$xu_{x'}(x)=x'u_{x'}(x) \tag{1}$$

$$\int u_{x'}^*(x)u_{x''}(x)dx=\delta(x'-x'') \tag{2}$$

を満たす関数ならば $u_{x'}(x)=\delta(x-x')$ となることを確かめておこう．

まず（1）から

$$(x-x')u_{x'}(x)=0$$

である．これは $x\neq x'$ で $u_{x'}(x)=0$ を意味する．いま $f(x)$ を $x=x'$ で微分可能な

関数とすると

$$f(x)=f(x')+(x-x')f'(x'+\theta(x-x')),\quad 0<\theta<1$$

が成立するので

$$\int f(x)u_{x'}(x)dx=\int[f(x')+(x-x')f'(x'+\theta(x-x'))]u_{x'}(x)dx$$

$$=f(x')\int u_{x'}(x)dx \qquad (3)$$

が得られるが，ここで

$$\int u_{x'}(x)dx=C(x')$$

とおけば（3）は

$$\int f(x)u_{x'}(x)dx=C(x')f(x')$$

となる．δ 関数の定義（11.6）[〃]，（11.7）[〃] を考慮すると

$$C(x')f(x')=\int C(x)f(x)\delta(x-x')dx$$

であるから

$$u_{x'}(x)=C(x')\delta(x-x')$$

とおけることがわかる．この式を（2）に代入すると

$$\int u_{x'}{}^*(x)u_{x''}(x)\,dx=\int C^*(x')C(x'')\delta(x-x')\delta(x-x'')dx$$

$$=|C(x')|^2\delta(x'-x'')=\delta(x'-x'')$$

となるので，これから

$$|C(x')|^2=1$$

が得られる．したがって $C(x')=1$ ととれば，

$$u_{x'}(x)=\delta(x-x')$$

　さて δ-関数の定義から

$$\int\psi(x')u_{x'}(x)dx'=\int\psi(x')\delta(x-x')dx'=\psi(x)$$

したがって $\psi(x)=\int A_{x'}u_{x'}(x)dx'$ となる $A_{x'}$ としては $\psi(x')$ をとればよいので，$u_{x'}(x)$ は完全系をなす．以上から $u_{x'}(x)$ は完全規格化直交系をなすことがわかった．また位置の確率関数 $P(x)$ は

$$P(x)=|A_x|^2=|\psi(x)|^2$$

である．

問題Ⅲ-3 ［第2版，Ⅲ-問3と同一］

一次元の問題でのポテンシャルエネルギー $V(x)$ が，x の単調増加関数であり，また時間に無関係ならば，すべての実数 x' に対して関数 $u_{V'}(x)=(dV/dx)_{x=x'}^{-1/2}\delta(x-x')$（ただし $V'=V(x')$）はポテンシャルエネルギーの固有値 V' に対応する固有関数で，完全規格直交系をつくることを示せ．また，ポテンシャルエネルギーの確率関数を求め，それが予想されるような性質をもつことを示せ．

〔解〕（**固有関数であること**）δ 関数の性質を使えば，

$$V(x)u_{V'}(x)=V(x)\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x'}^{-\frac{1}{2}}\delta(x-x')$$

$$=V(x')\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x'}^{-\frac{1}{2}}\delta(x-x')=V(x')u_{V'}(x) \qquad (1)$$

したがって $u_{V'}(x)$ は $V(x)$ の固有値 $V'=V(x')$ に属する固有関数である．

（**規格直交化されていること**）

$$\int_{-\infty}^{\infty}u_{V''}{}^*(x)u_{V'}(x)dx=\int\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x''}^{-\frac{1}{2}}\delta(x-x'')\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x'}^{-\frac{1}{2}}\delta(x-x')dx$$

$$=\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x''}^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x'}^{-\frac{1}{2}}\delta(x'-x'')$$

$$=\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x'}^{-1}\delta(x'-x'')$$

$$=\delta(V'-V'') \qquad (2)$$

ただし $V'=V(x')$，$V''=V(x'')$ であり，また最後の式の移行に際して問題Ⅲ-6の解答中の式（2）を使った．

（**完　全　性**）

$$\psi(x)=\int A_{V'}u_{V'}(x)dV' \qquad (3)$$

を満たす $A_{V'}$ を求めればよい．$A_{V'}$ は（3）の両辺に $u_{V''}{}^*(x)$ をかけて x で積分すれば，右辺は積分の順序を交換できるとして

$$\int u_{V''}{}^*(x)\left[\int A_{V'}u_{V'}(x)\,dV'\right]dx=\int A_{V'}dV'\left[\int u_{V''}{}^*(x)u_{V'}(x)dx\right]$$

$$=\int A_{V'}\delta(V'-V'')dV'=A_{V''}$$

左辺の方は

$$\int u_{V''}{}^*(x)\psi(x)dx=\int\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x''}^{-\frac{1}{2}}\delta(x-x'')\psi(x)dx=\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x''}^{-\frac{1}{2}}\psi(x'')$$

したがって（3）の展開係数 $A_{V'}$ として

$$A_{V'}=\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x'}^{-\frac{1}{2}}\psi(x')$$

をとれば $\psi(x)$ は $u_{V'}(x)$ で展開することができるので $u_{V'}(x)$ は完全系をなす.

（確　率　関　数）　ポテンシャルエネルギーの確率関数は,

$$P(V)=|A_V|^2=\left(\frac{dV}{dx}\right)^{-1}|\psi(x)|^2$$

で与えられる.

$$\int P(V)dV=\int|A_V|^2dV=\int\left(\frac{dV}{dx}\right)^{-1}|\psi(x)|^2dV$$

$$=\int\left(\frac{dV}{dx}\right)^{-1}|\psi(x)|^2\frac{dV}{dx}dx$$

$$=\int|\psi(x)|^2dx=1$$

$$\int V(x)P(V)dV=\int V(x)\left(\frac{dV}{dx}\right)^{-1}|\psi(x)|^2dV=\int V(x)|\psi(x)|^2dx$$

$$=\langle V\rangle$$

となるので $P(V)$ はポテンシャルエネルギーの確率関数として要求される性質をそなえている.

問題Ⅲ-4　［第2版，Ⅲ-問4と同一］

運動量固有関数の規格化を立方体の箱でなしに，直方体の箱で行なった場合，§11 での議論はどのように変更する必要があるか？

［解］ x, y, z 方向に長さ L_x, L_y, L_z の箱で規格化すると境界での周期条件から（11.3）［〃］に対応する式は

$$k_x=\frac{2\pi n_x}{L_x},\quad k_y=\frac{2\pi n_y}{L_y},\quad k_z=\frac{2\pi n_z}{L_z}$$

となる. 運動量の固有関数は,

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=(L_xL_yL_z)^{-1/2}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

であり，(11.5)［〃］に対応する規格化積分は，積分の上限，下限でそれぞれ

$$L \longrightarrow L_x,\ L_y,\ L_z$$

の変更を行なえばよい．連続固有値への移行も同様の手続きで得られる．

問題III－5 ［第2版，III-問5と同一］

式 (11.9)［〃］で与えられたような Dirac の δ 関数の表示を他に二つ求めよ．

〔解〕

1) 確率分布関数で，分布のひろがりをあらわすパラメーターを小さくすれば δ 関数に近づくことが期待される．たとえば Gauss 分布

$$g_1(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}$$

は平均値 0，分散 1 の確率分布である．したがって

$$g_\epsilon(x)=\frac{1}{\epsilon}g_1\left(\frac{x}{\epsilon}\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon^2}}e^{-x^2/2\epsilon^2},\quad \epsilon>0 \tag{1}$$

は平均値 0，分散 ϵ^2 の確率分布である．これより

$$\lim_{\epsilon\to+0} g_\epsilon(x)=\delta(x). \tag{2}$$

他に一様分布

$$u_1(x)=\begin{cases}1/2, & |x|\leq 1\\ 0\ , & |x|>1\end{cases} \tag{3}$$

から

$$\lim_{\epsilon\to+0} u_\epsilon(x)\equiv \lim_{\epsilon\to+0}\frac{1}{\epsilon}u_1\left(\frac{x}{\epsilon}\right)=\delta(x) \tag{4}$$

や Cauchy 分布

$$C_1(x)=\frac{1}{\pi}\cdot\frac{1}{x^2+1} \tag{5}$$

から

$$\lim_{\epsilon\to+0} C_\epsilon(x)\equiv \lim_{\epsilon\to+0}\frac{1}{\epsilon}C_1\left(\frac{x}{\epsilon}\right)=\lim_{\epsilon\to+0}\frac{1}{\pi}\ \frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2}=\delta(x) \tag{6}$$

も得られるが，（1）が（3）や（5）に対して有利なことは（1）が無限回微分可能であり，((3) は不連続関数) かつ $|x|\to\infty$ で大変早く 0 になる ((5) は $1/|x|^2$ 程

度）から，広い関数族 f に対して

$$\lim_{\epsilon\to+0}\int_{-\infty}^{\infty} g_\epsilon(x)f(x)dx=f(0)$$

や

$$\lim_{\epsilon\to+0}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d^n}{dx^n}g_\epsilon(x)\right)f(x)dx=(-1)^n f^{(n)}(0)$$

が証明できることである．しかし $g_\epsilon(x)$ は極限 $\epsilon\to+0$ をとる前はいたるところで正であり，δ 関数の一つの特徴である，ある点を除いては 0，という性質には程遠い．それで $g_\epsilon(x)$ よりももっと忠実に $\delta(x)$ を近似するものとして

2）

$$\omega_1(x)=\begin{cases}C\cdot\exp[-1/(1-x^2)], & |x|<1\\ 0 & |x|\geqq 1.\end{cases} \tag{7}$$

ここに C は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\omega_1(x)dx=1 \quad つまり \quad C^{-1}=\int_{-1}^{1}\exp[-1/(1-x^2)]dx$$

で与えられる定数である．

$\lim_{|x|\to1-0}(d/dx)^n\exp[-1/(1-x^2)]=0$, $(n=0,1,2,\cdots\cdots)$ が成り立つから，$\omega_1(x)$ は $x=\pm1$ においても無限回微分可能である．

$$\omega_\epsilon(x)=\frac{1}{\epsilon}\omega_1\left(\frac{x}{\epsilon}\right),\quad \epsilon>0 \tag{8}$$

とおくと，これは $|x|\geqq\epsilon$ では零，無限回微分可能かつ全区間で積分すれば 1 であるから

$$\lim_{\epsilon\to+0}\omega_\epsilon(x)=\delta(x) \tag{9}$$

が成り立つ．

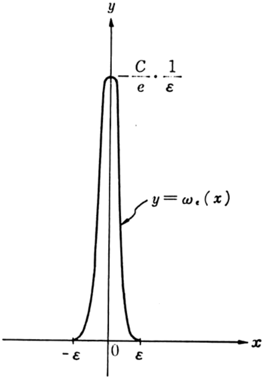


図　8

問題Ⅲ-6　［第2版，Ⅲ-問6と同一］

δ 関数を含む式（11.13）［〃］のそれぞれを証明せよ．

〔解〕

1）　$\delta(x)=\delta(-x)$

$$\int f(x)\,\delta(-x)\,dx=\int f(-x)\,\delta(x)\,dx=f(0)=\int f(x)\delta(x)\,dx$$

したがって，$\delta(x)=\delta(-x)$

2) $\delta'(x)=-\delta'(-x)$

部分積分を使って

$$\int f(x)\delta'(x)\,dx=-\int f'(x)\delta(x)\,dx=-f'(0)$$

$$\int f(x)[-\delta'(-x)]\,dx=-\int f(-x)\delta'(x)\,dx$$

$$=\int\left[\frac{d}{dx}f\,(-x)\right]\delta(x)\,dx=-f'(0)$$

したがって，$\delta'(x)=-\delta'(-x)$

3) $x\delta(x)=0$

$$\int f(x)\,[x\delta(x)]\,dx=\int[f(x)x]\delta(x)\,dx=f(0)\times 0=0$$

したがって，$x\delta(x)=0$

4) $x\delta'(x)=-\delta(x)$

これは本文に証明があるが，次のように考えることもできる．

$$\int\frac{\delta(x+\Delta x)-\delta(x)}{\Delta x}xf(x)\,dx=\frac{-\Delta xf(-\Delta x)}{\Delta x}=-f(-\Delta x)$$

$$=-\int\delta(x+\Delta x)f(x)\,dx$$

が成り立つので，この両辺で $\Delta x\to 0$ の極限をとれば

$$\lim_{\Delta x\to 0}\int\frac{\delta(x+\Delta x)-\delta(x)}{\Delta x}xf(x)\,dx=-\lim_{\Delta x\to 0}\int\delta(x+\Delta x)f(x)\,dx$$

極限装作と積分の順序を交換し，左辺の極限をとることを

$$\int\delta'(x)xf(x)\,dx$$

と書けば

$$\int x\delta'(x)f(x)\,dx=-\int\delta(x)f(x)\,dx$$

したがって，$x\delta'(x)=-\delta(x)$

5) $\delta(ax)=a^{-1}\delta(x)$，$a>0$

$$\int f(x)\delta(ax)dx=\int f\left(\frac{x}{a}\right)\delta(x)\frac{dx}{a}=\frac{1}{a}f(0)=\frac{1}{a}\int f(x)\delta(x)dx$$

したがって，$\delta(ax)=a^{-1}\delta(x)$

6) $\delta(x^2-a^2)=(2a)^{-1}[\delta(x-a)+\delta(x+a)]$，$a>0$

$x^2-a^2=0$ の根は $x=\pm a$ であるから積分を二つに分け，$x^2-a^2=\xi$ なる変数変換をすると，

$$\int f(x)\,\delta(x^2-a^2)\,dx=\int_{-\infty}^{0}f(x)\,\delta(x^2-a^2)\,dx+\int_{0}^{\infty}f(x)\delta(x^2-a^2)dx$$

$$=-\int_{-a^2}^{\infty}f(-\sqrt{\xi+a^2})\delta(\xi)\frac{d\xi}{-2\sqrt{\xi+a^2}}+\int_{-a^2}^{\infty}f(\sqrt{\xi+a^2})\delta(\xi)\frac{d\xi}{2\sqrt{\xi+a^2}}$$

$$=\frac{1}{2a}[f(a)+f(-a)]$$

$$=\int f(x)\frac{1}{2a}[\delta(x-a)+\delta(x+a)]dx$$

したがって

$$\delta(x^2-a^2)=(2a)^{-1}[\delta(x-a)+\delta(x+a)]$$

7) $\int\delta(a-x)\delta(x-b)dx=\delta(a-b)$

$$\int da\,f(a)\left[\int\delta(a-x)\delta(x-b)dx\right]=\int dx\,\delta(x-b)\left[\int da f(a)\delta(a-x)\right]$$

$$=\int dx\delta(x-b)f(x)=f(b)=\int f(a)\delta(a-b)da$$

したがって

$$\int\delta(a-x)\delta(x-b)dx=\delta(a-b)$$

8) $f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a)$

$$\int g(x)f(x)\delta(x-a)dx=g(a)f(a)=\int g(x)f(a)\delta(x-a)dx$$

したがって，$f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a)$

〔注〕 なお，5)，6) の結果を拡張すれば，次の公式が成り立つのでついでに証明しておく．

$$f(x_i)=0,\quad f'(x_i)\neq 0\quad i=1,2,\cdots\cdots$$

ならば

$$\delta(f(x))=\sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i) \qquad (1)$$

証明

$$\int g(x)\delta(f(x))dx=\sum_i \int_{x_i-\epsilon}^{x_i+\epsilon} g(x)\delta(f(x))dx$$

ここで $\xi=f(x)$ とおけば，$f(x_i)=0$ なので区間 $[x_i-\epsilon, x_i+\epsilon]$ に対応する ξ の区間を $[-\delta_1, \delta_2]$ とすれば上の積分は

$$\sum_i \int_{-\delta_1}^{\delta_2} g(f^{-1}(\xi))\,\delta(\xi)\frac{1}{\left|\frac{d\xi}{dx}\right|}d\xi$$

$$=\sum_i g(f^{-1}(\xi_i))\frac{1}{\left|\frac{d\xi}{dx}\right|_{\xi=\xi_i}}$$

$$=\sum_i g(x_i)\frac{1}{|f'(x_i)|}=\sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\int g(x)\delta(x-x_i)dx$$

したがって

$$\int g(x)\delta(f(x))dx=\int g(x)\left[\sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i)\right]dx$$

なお，$f(x)$ が単調増加ならば，（1）から

$$\delta(f(x)-f(x_0))=\frac{1}{f'(x_0)}\delta(x-x_0) \qquad (2)$$

が得られる．

問題Ⅲ-7 ［第2版，Ⅲ-問7と同一］

(11.20)［〃］の二つの方程式が正しいということ，すなわち (11.19)［〃］, (11.17)［〃］で定義されている規格化された ψ の運動量の確率関数は，和または積分をすることによって1になるということを示せ．

〔解〕 $\mathbf{k}$ が離散的固有値の場合 (11.17)［〃］より

$$\sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k})=\sum_{\mathbf{k}}|A_{\mathbf{k}}|^2=\sum_{\mathbf{k}}\left[\int u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\right]\left[\int u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}'')d\mathbf{r}''\right]$$

$$=\sum_{\mathbf{k}}\left[\int u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\psi^*(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\right]\left[\int u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}'')\,\psi(\mathbf{r}'')d\mathbf{r}''\right]$$

$$=\sum_{\mathbf{k}}\int d\mathbf{r}'\int d\mathbf{r}''[u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}'')u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')]\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'')$$

ここで和と積分の順序を入れ換え，(11.14)［〃］を使うと

$$=\int d\mathbf{r}'\int d\mathbf{r}''[\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}'')u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')]\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'')$$

$$=\int d\mathbf{r}'\int d\mathbf{r}''\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'')$$

$$=\int d\mathbf{r}'\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')$$

$$=1$$

したがって

$$\sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k})=1$$

$\mathbf{k}$ が連続的固有値の場合も同じようにしてできる．

問題Ⅲ-8　［第2版，Ⅲ-問8と同一］

式 (10.19)［〃］の被積分関数の括弧内の表式を使えば，ある時刻 t' における ψ を他の時刻 t における ψ であらわすことができる．一次元の場合にこの式を $iG(x',t';x,t)$ とあらわすことにすれば，

$\psi(x',t')=i\int G(x',t';x,t)\psi(x,t)dx$　となる．一次元の自由粒子に対しては

$$G_0(x',t';x,t)=-i\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t'-t)}\right]^{\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{im(x'-x)^2}{2\hbar(t'-t)}\right]$$

となることを示し，ψ が $t=0$ において規格化された最小波束 (12.11)［〃］の形をしていると仮定して，上の結果を用いて他の時刻 t' における ψ と $|\psi|^2$ とを求めよ．この G_0 は一次元での自由粒子の Green 関数とよばれている（§36.［§26］を参照）．

〔**解**〕今考えているのは自由粒子だから，エネルギーの固有関数 $u_E(x)$ は (11.11)［〃］で一次元としたもので与えられ

$$u_E(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx},\quad k^2=2mE/\hbar^2$$

である．$iG_0(x't';xt)$ は (10.19)［〃］のかっこ内の式で与えられるが，固有値が連続であるから，和を積分で置き換えなければならない．したがって

$$iG_0(x't';xt)=\frac{1}{2\pi}\int dk\, e^{ik(x'-x)}\, e^{-i(\hbar/2m)k^2(t'-t)}\tag{1}$$

となる．右辺は

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk\exp\left[-i\left\{\frac{\hbar}{2m}(t'-t)k^2-(x'-x)k\right\}\right]$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk\exp\left[-i\frac{\hbar}{2m}(t'-t)\left(k-\frac{m}{\hbar}\frac{x'-x}{t'-t}\right)^2+i\frac{m}{2\hbar}\frac{(x'-x)^2}{t'-t}\right]$$

$$=\frac{1}{2\pi}\exp\left[\frac{im(x'-x)^2}{2\hbar(t'-t)}\right]\int_{-\infty}^{\infty}dk\exp\left[-i\frac{\hbar}{2m}(t'-t)\left(k-\frac{m}{\hbar}\frac{x'-x}{t'-t}\right)^2\right]$$

この積分は複素積分を使って計算できる（注を参照）．注の（9）式で $a=\dfrac{\hbar}{2m}(t'-t)$ とおくことにより，結局

$$iG_0(x't'\,;\,xt)=\frac{1}{2\pi}\exp\left[\frac{im(x'-x)^2}{2\hbar(t'-t)}\right]\times\left[\frac{2m\pi}{i\hbar(t'-t)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

したがって

$$G_0(x't'\,;\,xt)=-i\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t'-t)}\right]^{\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{im(x'-x)^2}{2\hbar(t'-t)}\right] \tag{2}$$

を得る．さて $G_0(x't'\,;\,xt)$ が求まったので（10.19）［〃］から

$$\psi(x',t')=\int_{-\infty}^{\infty}iG_0(x't'\,;\,xt)\psi(x,t)dx$$

$$=\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t'-t)}\right]^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{im(x'-x)^2/2\hbar(t'-t)}\,\psi(x,t)dx \tag{3}$$

ここで $\psi(x,t)=\psi(x,t=0)$ として最小波束（12.11）［〃］を使うと

$$\psi(x',t')=\left[\frac{m}{2\pi i\hbar t'}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{1}{2\pi(\Delta x)^2}\right]^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{4(\Delta x)^2}+\frac{i\langle p\rangle x}{\hbar}+\frac{im(x'-x)^2}{2\hbar t'}\right]$$

ところでこの波動関数であらわされる粒子は，平均速度 $\langle p\rangle/m$ で動いているので，t' 秒後には波束の中心 $\langle x\rangle$ は $\langle x\rangle+\dfrac{\langle p\rangle}{m}t'$ になり，$t=0$ の波束の形から類推すると $x-\langle x\rangle$ は $x'-\langle x\rangle-\dfrac{\langle p\rangle}{m}t'$ に変わるだろうと予想される．つまり

$$x\longrightarrow x'-\frac{\langle p\rangle}{m}t'$$

の変化が予想されるので，ここで変数変換

$$y=x-\left(x'-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)$$

を行なうと，上の積分は

$$\exp\left[-\frac{\left(x'-\langle x\rangle-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)^2}{4(\Delta x)^2}+i\frac{\langle p\rangle}{\hbar}\left(x'-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)+i\frac{\langle p\rangle^2}{2m\hbar}t'\right]$$
$$\times\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp\left[\left(-\frac{1}{4(\Delta x)^2}+\frac{im}{2\hbar t'}\right)y^2-\frac{1}{2(\Delta x)^2}\left(x'-\langle x\rangle-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)y\right]$$

となるが，これも複素積分を使って計算でき，注の（11）式で

$$\alpha=\frac{1}{4(\Delta x)^2}-\frac{im}{2\hbar t'},\quad \beta=-\frac{1}{2(\Delta x)^2}\left(x'-\langle x\rangle-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)$$

とおけば求まるので，その結果を使えば上の積分は

$$\exp\left[-\frac{\left(x'-\langle x\rangle-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)^2}{4(\Delta x)^2}+i\frac{\langle p\rangle}{\hbar}\left(x'-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)+i\frac{\langle p\rangle^2}{2m\hbar}t'\right]$$
$$\times\sqrt{\pi}\left[\frac{1}{4(\Delta x)^2}-\frac{im}{2\hbar t'}\right]^{-\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{\left(x'-\langle x\rangle-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)^2}{4\left(\frac{1}{4(\Delta x)^2}-\frac{im}{2\hbar t'}\right)\cdot 4(\Delta x)^4}\right]$$
$$=\sqrt{\pi}\left[\frac{1}{4(\Delta x)^2}-\frac{im}{2\hbar t'}\right]^{-\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{\left(x'-\langle x\rangle-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)^2}{4(\Delta x)^2+2i\hbar t'/m}\right.$$
$$\left.+i\frac{\langle p\rangle}{\hbar}\left(x'-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)+i\frac{\langle p\rangle^2}{2m\hbar}t'\right]$$

これを $\psi(x',t')$ の式に代入すると最終的な結果として

$$\psi(x',t')=\frac{1}{(2\pi)^{1/4}}\frac{1}{\left[\Delta x+\frac{i\hbar t'}{2m\Delta x}\right]^{1/2}}$$
$$\times\exp\left[-\frac{\left(x'-\langle x\rangle-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)^2}{4(\Delta x)^2+2i\hbar t'/m}+i\frac{\langle p\rangle}{\hbar}\left(x'-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)+i\frac{\langle p\rangle^2}{2m\hbar}t'\right]\qquad(4)$$

が得られる．これから

$$|\psi(x',t')|^2=\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\frac{1}{\left[(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t'^2}{4m^2(\Delta x)^2}\right]^{1/2}}\exp\left[-\frac{\left(x'-\langle x\rangle-\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right)^2}{2\left[(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t'^2}{4m^2(\Delta x)^2}\right]}\right]\qquad(5)$$

これから $\int|\psi(x',t')|^2dx'=1$ であることがわかるが，また計算により

$$\langle x'\rangle=\langle x\rangle+\frac{\langle p\rangle}{m}t'$$

$$\langle p'\rangle=\langle p\rangle$$

$$\langle x'^2\rangle=(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t'^2}{4m^2(\Delta x)^2}+\left[\langle x\rangle+\frac{\langle p\rangle}{m}t'\right]^2=(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t'^2}{4m^2(\Delta x)^2}+\langle x'\rangle^2$$

$$\langle p'^2\rangle=\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}+\langle p\rangle^2$$

であるので，(12.1)［〃］から

$$(\Delta x')^2=\langle x'^2\rangle-\langle x'\rangle^2=(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t'^2}{4m^2(\Delta x)^2}$$

$$(\Delta p')^2=\langle p'^2\rangle-\langle p'\rangle^2=\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$$

したがって

$$(\Delta x')^2(\Delta p')^2=\frac{\hbar^2}{4}\left[1+\frac{\hbar^2t'^2}{4m^2(\Delta x)^4}\right]>\frac{\hbar^2}{4} \tag{6}$$

が得られる．これから $t=0$ で $(\Delta x)(\Delta p)=\hbar/2$ が成り立っていても，$t>0$ ではもはや $(\Delta x)(\Delta p)=\hbar/2$ が成り立っていないことがわかる．

〔注1〕 $iG_0(x't';xt)$ を使って計算すると一般に最小波束でなくとも

$$\|\psi_{t'}\|^2\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x',t')\psi(x',t')dx'=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx\equiv\|\psi_t\|^2$$

が成り立つことが示される．

〔注2〕 ここでは複素積分により，解答の中に出てきた積分の求め方のあらすじを述べておこう．ただし

$$\int_0^{\infty}e^{-x^2}dx=\frac{\sqrt{\pi}}{2} \tag{7}$$

は既知とする．

いま $\alpha=re^{i\theta}$ を $\mathrm{Re}\,\alpha\geq0\left(|\theta|\leq\frac{\pi}{2}\right)$ なる複素数とし，正則関数 e^{-z^2} を複素平面上に図のような積分路をとって積分すると Cauchy の積分定理から

$$\int_C e^{-z^2}dz=0$$

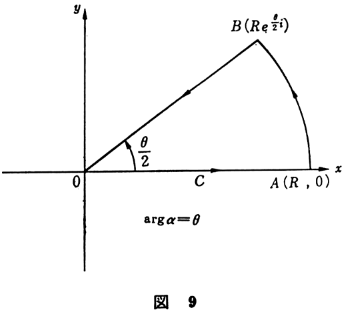


図 9

したがって

$$\int_0^R e^{-\alpha x^2}\alpha^{1/2}dx=\int_0^R e^{-x^2}dx+\int_0^{\theta/2}e^{-R^2e^{2i\varphi}}iRe^{i\varphi}d\varphi$$

ただし　$\alpha^{1/2}=\sqrt{r}\,e^{\frac{1}{2}i\theta}$ である．ところが

$$\left|\int_0^{\theta/2}e^{-R^2e^{2i\varphi}}iRe^{i\varphi}d\varphi\right|\leq\int_0^{\theta/2}e^{-R^2\cos2\varphi}Rd\varphi\longrightarrow0\quad(R\to\infty)$$

であるから，$R\to\infty$ とすると円周からの寄与は零になる．したがって

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x^2}dx=\frac{1}{\alpha^{1/2}}\int_0^\infty e^{-x^2}dx=\frac{1}{\alpha^{1/2}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

これから

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha x^2}dx=2\int_0^\infty e^{-\alpha x^2}dx=\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{1/2}}\quad(\mathrm{Re}\,\alpha\geqq0)\tag{8}$$

α が純虚数なら，$\alpha=\pm ia=e^{\pm\frac{\pi}{2}i}a$ $(a>0)$ とおいて

$$\int_{-\infty}^\infty e^{\pm iax^2}dx=e^{\pm\frac{\pi}{4}i}\sqrt{\frac{\pi}{a}}\quad(a>0)\tag{9}$$

次に $\alpha=re^{i\theta}$ を $\mathrm{Re}\,\alpha>0(|\theta|<\pi/2)$，$\beta$ を任意の複素数として $e^{-\alpha z^2}$ を図のような積分路 C' にそって積分すると上の場合と同様にして

$$\int_{C'}e^{-\alpha z^2}dz=0$$

したがって

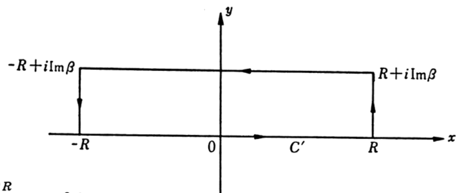


図　10

$$\int_{-R}^R e^{-\alpha(x+\beta)^2}dx=\int_{-R}^R e^{-\alpha x^2}dx$$
$$+\int_0^{\mathrm{Im}\beta}e^{-\alpha(R+it)^2}idt+\int_{\mathrm{Im}\beta}^0 e^{-\alpha(-R+it)^2}idt$$

右辺の後の二項は $R\to\infty$ で零になることがわかるので，結局

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha(x+\beta)^2}dx=\int_{-\infty}^\infty e^{-\alpha x^2}dx=\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{1/2}}\quad(\mathrm{Re}\,\alpha>0)\tag{10}$$

が得られる．これを使うと

$$\int_{-\infty}^\infty dx\exp[-\alpha x^2+\beta x]=\exp\left[\frac{\beta^2}{4\alpha}\right]\int_{-\infty}^\infty dx\exp[-\alpha(x-\frac{\beta}{2\alpha})^2]$$
$$=\exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right)\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{1/2}}\tag{11}$$

問題Ⅲ-9 ［第3版］

同じハミルトニアンの同一のエネルギー固有値に対応する二つの固有関数を $u_1(\mathbf{r})$ および $u_2(\mathbf{r})$ とする；これらは同一の関数でありうるし，あるいは縮退していることもありうる．これらに対して次の関係が成立することを示せ．

$$\int u_1{}^*(\mathbf{r})(xp_x+p_xx)u_2(\mathbf{r})d^3r=0$$

ただし，運動量演算子 $p_x=-i\hbar(\partial/\partial x)$ はその右側にくる量に作用するものとする．また，この問題と第二章の問題5との関係は何か？

〔解〕 ハミルトニアンとは演算子 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})$ のことを指すので，$u_1(\mathbf{r}), u_2(\mathbf{r})$ は共に固有方程式（10.2）［〃］

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right]u(\mathbf{r})=Eu(\mathbf{r})$$

を満足する．したがって（10.3）［〃］を考慮して

$$\int\left\{\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right)u_1{}^*(\mathbf{r})\right]x^2u_2(\mathbf{r})-u_1{}^*(\mathbf{r})x^2\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right)u_2(\mathbf{r})\right]\right\}d^3r$$
$$=\int\left[Eu_1{}^*(\mathbf{r})x^2u_2(\mathbf{r})-u_1{}^*(\mathbf{r})x^2Eu_2(\mathbf{r})\right]d^3r=0$$

である．一方左辺を変形すると

$$\int\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2u_1{}^*(\mathbf{r})\right]x^2u_2(\mathbf{r})-u_1{}^*(\mathbf{r})x^2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2u_2(\mathbf{r})\right]\right\}d^3r$$
$$+\int[V(\mathbf{r})u_1{}^*(\mathbf{r})x^2u_2(\mathbf{r})-u_1{}^*(\mathbf{r})x^2V(\mathbf{r})u_2(\mathbf{r})]d^3r$$

第二項は零だから

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\{[\nabla^2u_1{}^*(\mathbf{r})]x^2u_2(\mathbf{r})-u_1{}^*(\mathbf{r})x^2[\nabla^2u_2(\mathbf{r})\}d^3r$$

部分積分して

$$=+\frac{\hbar^2}{2m}\int\{[\nabla u_1{}^*(\mathbf{r})]\cdot\nabla[x^2u_2(\mathbf{r})]-\nabla[u_1{}^*(\mathbf{r})x^2]\cdot\nabla u_2(\mathbf{r})\}d^3r$$
$$=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left\{[\nabla u_1{}^*(\mathbf{r})]\cdot x^2\cdot\nabla u_2(\mathbf{r})+\left[\frac{\partial}{\partial x}u_1{}^*(\mathbf{r})\right]\cdot 2x\cdot u_2(\mathbf{r})\right.$$
$$\left.-[\nabla u_1{}^*(\mathbf{r})]x^2\nabla u_2(\mathbf{r})-u_1{}^*(\mathbf{r})2x\frac{\partial}{\partial x}u_2(\mathbf{r})\right\}d^3r$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}2\int\left[\frac{\partial u_1^*(\mathbf{r})}{\partial x}xu_2(\mathbf{r})-u_1^*(\mathbf{r})x\frac{\partial}{\partial x}u_2(\mathbf{r})\right]d^3r$$

部分積分して

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}2\int\left\{u_1^*(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial x}[xu_2(\mathbf{r})]+u_1^*(\mathbf{r})x\frac{\partial}{\partial x}u_2(\mathbf{r})\right\}d^3r$$

$$=\frac{\hbar}{im}\int u_1^*(\mathbf{r})(p_xx+xp_x)u_2(\mathbf{r})d^3r$$

となるので，結局

$$\int u_1^*(\mathbf{r})(xp_x+p_xx)u_2(\mathbf{r})d^3r=0$$

ここで $u_1(\mathbf{r})=u_2(\mathbf{r})=u_E(\mathbf{r})$ とおくと

$$\int u_E^*(\mathbf{r})(xp_x+p_xx)u_E(\mathbf{r})=\langle xp_x\rangle+\langle p_xx\rangle=0$$

問題Ⅱ-5と合わせて

$$\frac{d}{dt}\langle x^2\rangle=0$$

となることがわかる．

同様の議論を使うことによってエネルギーの固有状態に対しては

$$\frac{d}{dt}\langle f(x)\rangle=0$$

が成り立つことがわかる．

第 IV 章

離散的な固有値：束縛状態

問題IV-1　［第2版，IV-問1と同一］

Bohr-Sommerfeld の量子化の規則（§2［〃］参照）を適用して，調和振動子および水素原子の円形軌道のエネルギー準位を決定せよ．その結果を，この章で得られた結果と比較せよ．

〔解〕（**調和振動子**） ハミルトニアンおよびハミルトンの正準方程式は

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}Kq^2=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_c{}^2q^2$$

$$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p},\quad \dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q}$$

ただし K, ω_c は§13［〃］の定義によるものと同じ．

エネルギーは $E=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{1}{2}Kq^2$ であるから，作用積分は

$$J=\oint p\,dq=2\int_{q_1}^{q_2}\sqrt{2m(E-\tfrac{1}{2}Kq^2)}\,dq$$

ただし q_1, q_2 は $E-\frac{1}{2}Kq^2=0$ の2根（$q_{1,2}=\pm\sqrt{2E/K}$）．

したがって

$$J=2\sqrt{mK}(\sqrt{2E/K})^2\int_{-1}^{1}\sqrt{1-\cos^2\theta}\,d(\cos\theta)$$

$$=2\sqrt{mK}(\sqrt{2E/K})^2\int_0^{\pi}\sin^2\theta\,d\theta$$

$$=2\pi\sqrt{m/K}\;E=2\pi E/\omega_c$$

ここで Bohr-Sommerfeld の量子化条件 $J=\oint p\,dq=nh$ を適用すると

$$J=2\pi E/\omega_c=nh$$

したがって

$$E=n\hbar\omega_c$$

なお，この式では零点エネルギーが現われないが，量子化条件として $J=\oint pdq=(n+\frac{1}{2})h$ を採用すれば，(13.8)［〃］式と同じものが得られる．

(水素原子) この場合は中心力だから，平面運動を考えればよい．ハミルトニアンおよびハミルトンの正準方程式は

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(p_r^2+\frac{p_\theta^2}{r^2}\right)-\frac{Ze^2}{r}$$

$$\dot{r}=\frac{\partial H}{\partial p_r}=\frac{p_r}{\mu},\quad \dot{p}_r=-\frac{\partial H}{\partial r}=\frac{p_\theta^2}{\mu r^3}-\frac{Ze^2}{r^2}$$

$$\dot{\theta}=\frac{\partial H}{\partial p_\theta}=\frac{p_\theta}{\mu r^2},\quad \dot{p}_\theta=-\frac{\partial H}{\partial \theta}=0$$

ただし，μ は換算質量である．

ここで円運動の条件，$r=a=$一定，と上の方程式から $p_r=0$，$p_\theta=\sqrt{\mu aZe^2}=$一定が得られるので，Bohr-Sommerfeld の条件は，

$$J=\oint p_\theta d\theta=\int_0^{2\pi}\sqrt{\mu aZe^2}\,d\theta=2\pi\sqrt{\mu aZe^2}=nh$$

すなわち $a=\dfrac{n^2\hbar^2}{\mu Ze^2}$ となる．これからエネルギーを計算すると，

$$E=\frac{1}{2\mu}\left(p_r^2+\frac{p_\theta^2}{r^2}\right)-\frac{Ze^2}{r}=-\frac{Ze^2}{2a}=-\frac{\mu Z^2e^4}{2n^2\hbar^2}$$

この式は (16.15)［〃］式と一致する．なお一般に3次元で考え，軌道も円運動に制限しないときには，$J_\phi=\oint p_\phi d\phi$，$J_\theta=\oint p_\theta d\theta$，$J_r=\oint p_r dr$ を使って，$J_1=J_\phi=mh$，$J_2=J_\phi+J_\theta=lh$，$J_3=J_\phi+J_\theta+J_r=nh$ の条件を課すと

$$E=-\frac{2\pi^2\mu Z^2e^4}{(J_r+J_\theta+J_\phi)^2}=-\frac{\mu Z^2e^4}{2n^2\hbar^2}$$

が得られるが，くわしくは古典力学の教科書を参照．

問題Ⅳ-2　〔第2版，Ⅳ-問2と同じ〕

調和振動子に対する振動波束の解に，主として寄与する状態の量子数およびエネルギーの拡がりの大きさはどの程度か？

〔解〕 **(量子数の拡がり)**

(13.20)［〃］，(13.22)［〃］および $P_n=|A_n|^2$ を使って，

$$\langle n\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}nP_n=\sum_{n=0}^{\infty}n|A_n|^2=\sum_{n=0}^{\infty}n\frac{\xi_0{}^{2n}e^{-\frac{1}{2}\xi_0{}^2}}{2^n n!}$$

$$=e^{-\frac{1}{2}\xi_0{}^2}\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}\right)^n=e^{-\frac{1}{2}\xi_0{}^2}\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}\right)e^{\frac{1}{2}\xi_0{}^2}$$

$$=\frac{\xi_0{}^2}{2}=\frac{(\alpha a)^2}{2}=\frac{m\omega_c}{2\hbar}a^2$$

$$\langle n^2\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}n^2P_n=\sum_{n=0}^{\infty}n^2\frac{\xi_0{}^{2n}e^{-\frac{1}{2}\xi_0{}^2}}{2^n n!}=e^{-\frac{1}{2}\xi_0{}^2}\frac{\xi_0{}^2}{2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{(n-1)!}\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}\right)^{n-1}$$

$$=e^{-\frac{1}{2}\xi_0{}^2}\frac{\xi_0{}^2}{2}\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\frac{n-1}{(n-1)!}+\frac{1}{(n-1)!}\right\}\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}\right)^{n-1}$$

$$=e^{-\frac{1}{2}\xi_0{}^2}\frac{\xi_0{}^2}{2}\left\{\frac{\xi_0{}^2}{2}e^{\frac{1}{2}\xi_0{}^2}+e^{\frac{1}{2}\xi_0{}^2}\right\}$$

$$=\frac{\xi_0{}^2}{2}\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}+1\right)$$

したがって，

$$\langle\Delta n\rangle^2=\langle(n-\langle n\rangle)^2\rangle=\langle n^2\rangle-\langle n\rangle^2$$

$$=\frac{\xi_0{}^2}{2}\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}+1\right)-\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}\right)^2=\frac{\xi_0{}^2}{2}=\frac{(\alpha a)^2}{2}$$

これから，量子数の拡がりは

$$|\langle\Delta n\rangle|=\frac{1}{\sqrt{2}}\alpha|a|=\sqrt{m\omega_c/2\hbar}\cdot|a|$$

で与えられるので，$|a|$ すなわち $t=0$ における波束の中心の原点からの距離，および α に比例して大きくなる．

（エネルギーの拡がり）

$E=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$ であるから，

$$\langle E\rangle=\left\langle\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right\rangle=\left\{\langle n\rangle+\frac{1}{2}\right\}\hbar\omega_c$$

$$=\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c=\frac{1}{2}Ka^2+\frac{\hbar\omega_c}{2}$$

$$\langle E^2\rangle=\left\langle\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2\omega_c{}^2\right\rangle=\left\{\langle n^2\rangle+\langle n\rangle+\frac{1}{4}\right\}\hbar^2\omega_c{}^2$$

$$=\left\{\frac{\xi_0{}^2}{2}\left(\frac{\xi_0{}^2}{2}+1\right)+\frac{\xi_0{}^2}{2}+\frac{1}{4}\right\}\hbar^2\omega_c{}^2$$

なお $\langle E\rangle$ の式に出てくる $\frac{1}{2}Ka^2$ は，調和振動子の古典論でのエネルギーである．

$$\langle\Delta E\rangle^2=\langle E^2\rangle-\langle E\rangle^2=\left\langle\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2\omega_c{}^2\right\rangle-\left\langle\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right\rangle^2$$
$$=\hbar^2\omega_c{}^2\frac{\xi_0{}^2}{2}$$

したがって

$$|\langle\Delta E\rangle|=\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\omega_c|\xi_0|=\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\omega_c\alpha\,|a|=\sqrt{m\hbar\omega_c{}^3/2}\cdot|a|$$

となるので，エネルギーの拡がりは $|a|$ に比例して大きくなる．

問題Ⅳ-3　［第2版，Ⅳ-問3と同一］

Hermite の多項式の母関数を使って，積分

$$\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(x)x^2u_m(x)dx$$

の値を求めよ．ただし，u は規格化された調和振動子の波動関数である．

〔解〕 Hermite の多項式の母関数は (13.10)［〃］で与えられる．(13.14)［〃］式の計算と同様にして，

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-s^2+2s\xi}e^{-t^2+2t\xi}e^{-\xi^2}\xi^2\,d\xi=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n\,t^m}{n!\,m!}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}\xi^2\,d\xi \tag{1}$$

から出発する．まず左辺の計算をすると，

$$\text{左辺}=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(s^2+t^2)}e^{-\xi^2+2(t+s)\xi}\xi^2\,d\xi=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-[\xi-(t+s)]^2}e^{2ts}\xi^2\,d\xi$$
$$=e^{2ts}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-[\xi-(t+s)]^2}\xi^2\,d\xi$$

ここで　$\eta\equiv\xi-(t+s)$ として

$$=e^{2ts}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\eta^2}\{\eta+(t+s)\}^2d\eta=2e^{2ts}\int_0^{\infty}e^{-\eta^2}\{\eta^2+(t+s)^2\}\,d\eta$$
$$=\frac{\sqrt{\pi}}{2}e^{2ts}\{1+2(t+s)^2\}$$
$$=\frac{\sqrt{\pi}}{2}(2t^2+2s^2+4ts+1)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2ts)^n}{n!}$$
$$=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\{2^{n+1}s^{n+2}t^n+2^{n+1}s^nt^{n+2}+2^{n+2}s^{n+1}t^{n+1}+2^ns^nt^n\}$$

$$=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\left\{\frac{2^{n+1}}{n!}s^{n+2}t^n+\frac{2^{n+1}}{n!}s^nt^{n+2}+\frac{2^n}{n!}(2n+1)s^nt^n\right\}$$

この結果と（1）式の右辺とを比較すると，

$$\left.\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}\xi^2d\xi=\sqrt{\pi}\,n!2^{n-1}(2n+1)\\&\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)H_{n+2}(\xi)e^{-\xi^2}\xi^2d\xi=\sqrt{\pi}\,(n+2)!2^n\\&\int_{-\infty}^{\infty}H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}\xi^2d\xi=0\quad m\neq n,n\pm 2\end{aligned}\right\}\qquad(2)$$

ところで（13.13）［〃］，（13.17）［〃］より

$$u_n(x)=N_nH_n(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$N_n=\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^nn!}\right)^{1/2}$$

であるから，

$$\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(x)x^2u_m(x)\,dx=\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^nn!}\right)^{1/2}\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^mm!}\right)^{1/2}$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\alpha x)x^2H_m(\alpha x)e^{-\alpha^2x^2}dx$$

$$=\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^nn!}\right)^{1/2}\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^mm!}\right)^{1/2}\frac{1}{\alpha^3}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}\xi^2d\xi$$

（2）式の結果を適用すると，

$$\int_{-\infty}^{\infty}u_n{}^*(x)x^2u_m(x)\,dx=\begin{cases}\dfrac{1}{2\alpha^2}\sqrt{(m+2)(m+1)} & (n=m+2)\\[2mm]\dfrac{1}{2\alpha^2}(2m+1) & (n=m)\\[2mm]\dfrac{1}{2\alpha^2}\sqrt{m(m-1)} & (n=m-2)\\[2mm]0 & (n\neq m,\,m\pm 2)\end{cases}$$

が得られる．

同じ結果は行列の計算を用いても得られるが（§31-4［§25］）もちろん上の結果と一致する．

問題Ⅳ-4 ［第2版，Ⅳ-問4と同一］

Legendre の多項式の母関数を使って，積分

$$\int_{-1}^{1} P_l(w) P_{l'}(w) dw$$

の値を求めよ．

〔解〕 Legendre の多項式の母関数は（14.10）［〃］で与えられる．

$$\int_{-1}^{1} T(w,s) T(w,t) dw$$
$$=\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-2sw+s^2}} \frac{1}{\sqrt{1-2tw+t^2}} dw = \sum_l \sum_{l'} s^l t^{l'} \int_{-1}^{1} P_l(w) P_{l'}(w) dw \tag{1}$$

まず左辺を計算すると $s \neq t$ の場合

$$左辺 = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{(1+s^2)(1+t^2)-2[s(1+t^2)+t(1+s^2)w]+4stw^2}} dw$$
$$=\frac{1}{\sqrt{4st}} \ln \left| 8stw - 2[s(1+t^2)+t(1+s^2)] + 2\sqrt{4st(1-2sw+s^2)(1-2tw+t^2)} \right| \Big|_{-1}^{1}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{4st}} \ln \left| \frac{8st-2[s(1+t^2)+t(1+s^2)]+2\sqrt{4st(1-s)^2(1-t)^2}}{-8st-2[s(1+t^2)+t(1+s^2)]+2\sqrt{4st(1+s)^2(1+t)^2}} \right|$$
$$=\frac{1}{\sqrt{4st}} \ln \left| \frac{2[\sqrt{4st}-(s+t)][1+st+\sqrt{4st}]}{2[\sqrt{4st}-(s+t)][1+st-\sqrt{4st}]} \right|$$
$$=\frac{1}{\sqrt{4st}} \ln \frac{(1+\sqrt{st})^2}{(1-\sqrt{st})^2} = \frac{1}{\sqrt{st}} \ln \frac{1+\sqrt{st}}{1-\sqrt{st}} \qquad (s<1,\ t<1)$$

(最後の式は $s=t$ でも成り立つ.) ここで　$\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{x^n}{n}$ を使うと，

$$=\frac{1}{\sqrt{st}} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (-1)^{n-1} \frac{(\sqrt{st})^n}{n} - (-1)^{n-1} \frac{(-\sqrt{st})^n}{n} \right\}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{st}} \sum_{n=\mathrm{odd}} 2(-1)^{n-1} \frac{(\sqrt{st})^n}{n} = \frac{1}{\sqrt{st}} \sum_{l=0}^{\infty} 2(-1)^{2l+1-1} \frac{(\sqrt{st})^{2l+1}}{2l+1}$$
$$=\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2}{2l+1} (st)^l$$

ただし，$n=\mathrm{odd}$ の和は $n=1,3,5,\cdots\cdots$ についての和であるから，$n=2l+1$ として l についての和に直した．

上式の結果を（1）式の右辺と比較すると，

$$\int_{-1}^{1} P_l(w) P_{l'}(w) dw = \begin{cases} \dfrac{2}{2l+1} & (l=l') \\ 0 & (l \neq l') \end{cases} \tag{2}$$

が得られる.

問題Ⅳ-5　［第2版，Ⅳ-問5と同一］

V_0a^2 が $\pi^2\hbar^2/8m$ より僅かに大きいような角井戸型ポテンシャルのエネルギー準位（$l=0$）の近似式を解析的にあらわせ.

〔**解**〕 $l=0$ のエネルギー準位を求める式は（15.16）［〃］式,

$$\xi\cot\xi=-\eta,\quad \xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

である. ただし $\xi=\alpha a$, $\eta=\beta a$ である. $l=0$ の場合は, 一次元井戸型ポテンシャルの場合と同じになり, グラフは第9図で与えられる.

最初の束縛状態は $V_0a^2=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8m}$ のときあらわれ, V_0a^2 がこれより少し大きく, $V_0a^2=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8m}(1+\delta)$, $\delta\ll1$ のときの束縛状態は $\xi^2+\eta^2=\dfrac{\pi^2}{4}(1+\delta)$, と $\xi\cot\xi=-\eta$ の交点で与えられるが, これはグラフから予想されるように $(\xi,\eta)=\left(\dfrac{\pi}{2},\ 0\right)$ の近傍である. そこで今この交点の ξ の値を $\xi=\dfrac{\pi}{2}+\epsilon$ とおく. それに対応する η の値は

$$\eta\equiv f(\xi)=-\xi\cot\xi$$

とおいて

$$\eta\Big|_{\xi=\frac{\pi}{2}+\epsilon}=f\left(\frac{\pi}{2}+\epsilon\right)=f\left(\frac{\pi}{2}\right)+\epsilon f'\left(\frac{\pi}{2}\right)+0(\epsilon^2)=\frac{\pi}{2}\epsilon+0(\epsilon^2)$$

これらの値を $\xi^2+\eta^2=\dfrac{\pi^2}{4}(1+\delta)$ に代入し, ϵ の一次までとると

$$\epsilon=\frac{\pi}{4}\delta,\quad \xi=\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{4}\delta,\quad \eta=\frac{\pi^2}{8}\delta$$

したがって

$$|E|=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\eta^2=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\pi^2\delta}{8}\right)^2=\frac{\pi^4\hbar^2}{128ma^2}\delta^2$$

$$=\frac{\pi^4\hbar^2}{128ma^2}\left[\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2\pi^2}-1\right]^2=\frac{m}{2\hbar^2a^2}\left[V_0a^2-\frac{\pi^2\hbar^2}{8m}\right]^2$$

問題Ⅳ-6　［第2版，Ⅳ-問6と同一］

角井戸型ポテンシャルにおいて, 0より大きな値の l を持つ新しいエネルギー準位でちょうど束縛状態を作るにたる V_0a^2 の値は $\hbar^2z^2/2m$ で与えら

れることを示せ．ただしこの z は $j_{l-1}(z)=0$ の方程式を満足する零でない解である（[第2版 p.95，第3版 p.101］の脚注参照）

〔解〕 ポテンシャル内外での解は（15.11）[〃]，（15.14）[15.17] で与えられ，

$$R_l(r)=\begin{cases} A\,j_l(\alpha r) & (r<a) \\ B\,h_l^{(1)}(i\beta r) & (r>a) \end{cases}$$

$r=a$ で，$\dfrac{d}{dr}R_l/R_l$ が連続でなければならないから，

$$\frac{\alpha j_l'(\alpha a)}{j_l(\alpha a)}=\frac{i\beta h_l^{(1)\prime}(i\beta a)}{h_l^{(1)}(i\beta a)} \qquad (1)$$

ここで(15.10)〔〃〕と(15.12)〔〃〕から得られる公式

$$j_l'(z)=j_{l-1}(z)-\frac{l+1}{z}j_l(z)$$

$$h_l^{(1)\prime}(z)=h_{l-1}^{(1)}(z)-\frac{l+1}{z}h_l^{(1)}(z)$$

を使って（1）式を変形すると，

$$\frac{\alpha\left[j_{l-1}(\alpha a)-\dfrac{l+1}{\alpha a}j_l(\alpha a)\right]}{j_l(\alpha a)}=\frac{i\beta\left[h_{l-1}^{(1)}(i\beta a)-\dfrac{l+1}{i\beta a}h_l^{(1)}(i\beta a)\right]}{h_l^{(1)}(i\beta a)}$$

$\alpha a=\xi$，$\beta a=\eta$ とおいて，

$$\frac{\xi j_{l-1}(\xi)}{j_l(\xi)}=\frac{i\eta h_{l-1}^{(1)}(i\eta)}{h_l^{(1)}(i\eta)} \qquad (2)$$

さて $|E|\approx 0$，すなわち $\eta\approx 0$ での解は（2）で $\eta\approx 0$ とおけばよいが，(15.7)〔〃〕を(15.12)〔〃〕に代入して得られる公式

$$h_l^{(1)}(z)\sim -i(2l-1)!!/z^{l+1} \quad (z\sim 0)$$

を使うと $\eta\to 0$ で（2）の右辺は

$$\frac{i\eta h_{l-1}^{(1)}(i\eta)}{h_l^{(1)}(i\eta)}\sim\frac{-\eta^2}{2l-1}\longrightarrow 0 \quad (\eta\to 0)$$

したがって，新たに束縛状態があらわれるところ（$E=0$）での条件は，

$$\frac{\xi j_{l-1}(\xi)}{j_l(\xi)}=0$$

を解けば求まる．これからエネルギー準位を求める条件は $j_{l-1}(\xi)=0$ となる．$(\xi\neq 0)$*)

*) $\dfrac{\xi j_{l-1}(\xi)}{j_l(\xi)}\longrightarrow\dfrac{(2l+1)!!}{(2l-1)!!}=2l+1\neq 0 \quad (\xi\to 0)$

$j_{l-1}(\xi)=0$ の根を z とすると，$\xi=a\alpha=a\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0-|E|)}\approx a\sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}$ から，

$$V_0a^2=\frac{\hbar^2z^2}{2m}.$$

問題Ⅳ－7 ［第2版，Ⅳ-問7と同一］

重水素を作っている中性子と陽子との間の相互作用は，$a=2.00$[*]$\times10^{-13}$ cm の角井戸型ポテンシャルで表わすことができると仮定する．この系の最低のエネルギー準位（$l=0$）が -2.23[**] Mev(10^6 ev) として，V_0 を有効数字三桁まで計算せよ．この答えを問題5で導いた近似式から得たものと比べればどうか？

〔**解**〕 必要な物理定数は

陽子の静止エネルギー　$m_pc^2=938.28$ Mev,

中性子の静止エネルギー　$m_nc^2=939.57$ Mev,

$\hbar=1.0546\times10^{-27}$ erg・sec,

$c=2.9979\times10^{10}$ cm/sec,

1 Mev $=1.6022\times10^{-6}$ erg.

ここで $\hbar=c=1$ の単位系をとる．この単位系で 1 Mev は

$$\frac{1.6022\times10^{-6}}{1.0546\times10^{-27}\times2.9979\times10^{10}}=5.0677\times10^{10}\mathrm{cm}^{-1}$$

となる．すると

$$m_p=4.7549\times10^{13}\mathrm{cm}^{-1},$$

$$m_n=4.7615\times10^{13}\mathrm{cm}^{-1},$$

$$E_0=-2.23\ \mathrm{Mev}=-1.13\times10^{11}\mathrm{cm}^{-1},$$

$$m=\frac{m_pm_n}{m_p+m_n}=2.3791\times10^{13}\mathrm{cm}^{-1}.$$

これより

$$\beta a=\sqrt{2m|E_0|}a=0.464.$$

$\pi>\alpha>\pi/2$ での $\alpha\cot\alpha a=-\beta$ の解を求めると

---

*) 第2版では 2.80,　**) 第2版では 2.18

$$\alpha a = 1.82.$$

したがって

$$V_0 = \frac{1}{2m}(\alpha^2+\beta^2) = 1.85\times 10^{12}\mathrm{cm}^{-1}.$$

この V_0 を Mev の単位にもどすと

$$V_0 = 1.85\times 10^{12} \div (5.07\times 10^{10}) = 36.5\ \mathrm{Mev}. \qquad (1)$$

一方問題Ⅳ-5の近似式を用いると

$$|E_0| \simeq \frac{m}{2\hbar^2 a^2}\left[V_0 a^2 - \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}\right]^2$$

であるから

$$V_0 \simeq \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} + \frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{2|E_0|}{m}}$$

となり，$\hbar = c = 1$ の単位系では

$$V_0 \simeq \frac{\pi^2}{8ma^2} + \sqrt{\frac{2|E_0|}{ma^2}} = 1.78\times 10^{12}\mathrm{cm}^{-1}.$$

もとの単位系では

$$V_0 \simeq 35.1\ \mathrm{Mev}. \qquad (2)$$

（1）と（2）とを比べるとかなりよく合っている．これはポテンシャルの深さに比べて重陽子の束縛エネルギーが小さいからである．

問題Ⅳ-8　［第2版，Ⅳ-問8と同一］

式 (14.17)［〃］で $l=0$, $V(r) = -V_0 e^{-r/a}$ としたものを考える．変数を r から $z = e^{-r/2a}$ に変え，その結果 Bessel の方程式が導かれることを示せ．z の関数としての χ にはどんな境界条件を課せばよいか？　また，エネルギー準位を決めるのにどういうふうにこれらの条件は用いられるか？　束縛状態が存在するための V_0 の下限はいくらか？

〔**解**〕(14.17)［〃］で $l=0$, $V(r) = -V_0 e^{-r/a}$ とすると，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} - V_0 e^{-r/a}\chi = E\chi, \quad E<0 \qquad (1)$$

$z = e^{-r/2a}$, $\chi(r) = f(z)$ とおくと，

$$\left[\frac{d^2}{dz^2}+\frac{1}{z}\frac{d}{dz}+\frac{8ma^2V_0}{\hbar^2}+\frac{8ma^2E}{\hbar^2}\frac{1}{z^2}\right]f(z)=0$$

ここで

$$\nu^2=-\frac{8a^2mE}{\hbar^2},\quad \beta^2=\frac{8a^2m}{\hbar^2}V_0$$

とおけば

$$\frac{d^2f}{dz^2}+\frac{1}{z}\frac{df}{dz}+\left(\beta^2-\frac{\nu^2}{z^2}\right)f(z)=0 \tag{2}$$

この微分方程式の解は Bessel 関数で表わされ

$$f(z)=AJ_\nu(\beta z)+BN_\nu(\beta z)$$

となる．

境界条件は $r\to\infty$ のとき，$R(r)=\dfrac{\chi(r)}{r}\to 0$ だから，$z\to 0$ のとき $f(z)\to o(\log|z|)$ これから $B=0$．また $\chi(0)=0$ から $f(1)=0$．すなわち

$$f(1)=AJ_\nu(\beta)=0$$

これがエネルギー準位を決定する固有値方程式である．束縛状態が初めてできる ($E=0$) ための条件は，$E=0$ で $\nu=0$ だから，

$$J_0(\beta)=0$$

$J_0(z)$ の零点を大きさの順に $j_{0,1}<j_{0,2}<\cdots\cdots$ とすると，β は最小の零点よりも大きくなければならない．したがって

$$\beta\geq j_{0,1}$$

すなわち

$$V_0a^2\geq\frac{\hbar^2}{8m}j_{0,1}{}^2\quad (j_{0,1}\simeq 2.40483)$$

問題Ⅳ-9　［第2版，Ⅳ-問9と同一］

完全剛体の壁をもつ二次元の円形の箱の中での粒子の固有関数とエネルギー準位をあらわす式を求めよ．

〔解〕 Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]\psi(x,y)=E\psi(x,y)\quad x^2+y^2<a^2,\ E\geq 0 \tag{1}$$

であり，境界条件は $x^2+y^2=a^2$ で $\psi(x,y)=0$ である．極座標を導入すると

$\psi(x,y)=\psi(r,\phi)$ の固有方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi(r,\phi)=E\psi(r,\phi) \quad r<a \qquad (2)$$

となる．ここで

$$\psi(r,\phi)=R(r)\Phi(\phi)$$

として変数分離すれば分離定数を n^2 として

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+n^2\Phi=0$$

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dR}{dr}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{n^2}{r^2}\right)R=0,\quad R(a)=0 \qquad (3)$$

$\Phi(\phi)$ に対する一次独立な解は $e^{\pm in\phi}$ であり，周期条件より $n=0,1,2,3,\cdots\cdots$ すなわち

$$\Phi(\phi)=e^{\pm in\phi} \quad n=0,1,2,3,\cdots\cdots$$

が得られる．

$R(r)$ の方程式の一次独立な解は Bessel 関数で表わされ，$J_n\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r\right)$, $N_n\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r\right)$ である．ところで $J_n(z)$，$N_n(z)$ の $z\to0$ でのふるまいは

$$J_n(z)\sim\frac{1}{n!}\left(\frac{z}{2}\right)^n \qquad n\geq1$$

$$N_n(z)\sim-\frac{(n-1)!}{\pi}\left(\frac{2}{z}\right)^n \qquad n\geq1$$

$$J_0(z)\sim1$$

$$N_0(z)\sim\frac{2}{\pi}\log z$$

であるから，$n\geq1$ のとき $N_n\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r\right)$ は規格化できないのでこれは排除される．また $N_0\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r\right)$ は規格化できるが，(3)が E に対する固有値方程式として意味を持つためには $r\sim0$ で固有関数ができるだけ良い振舞をしなければならないのでこれも排除する．したがって動径部分の固有関数は

$$R_n(r)=A_nJ_n\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r\right) \qquad n=0,1,2,\cdots\cdots$$

である．エネルギー固有値は境界条件より求められ

$$J_n\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a\right)=0$$

から，$J_n(z)$ の零点を j_n と書けば

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2ma^2}(j_n)^2$$

と表わされる．ところで $n\geq1$ のとき $z=0$ は $J_n(z)$ の零点なので上の式から固有値として $E_n=0$ が得られる．しかし（3）式で $E=0$ とおいて解を求めると一次独立な解は r^n, r^{-n} であり，後者は規格化できず，前者は境界条件より恒等的に零となる．結局 $n\geq1$ のとき $E=0$ の解は存在しない．また Bessel 関数の零点は無数にあるので，n 次の Bessel 関数 $J_n(z)$ の零点のうち零でないものを小さいものから順に番号をつけることにし

$$j_{n,1}<j_{n,2}<j_{n,3}<\cdots\cdots$$

とすると固有関数およびエネルギー固有値は

$$\psi=A_n^{(\pm)}J_n(j_{n,k}r/a)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm in\phi} \qquad n=0,1,2,\cdots\cdots$$

$$E_{n,k}=\frac{\hbar^2}{2ma^2}(j_{n,k})^2 \qquad k=1,2,3,\cdots\cdots$$

ただし $n=0$ に対しては $A_0^{(+)}=A_0^{(-)}=A_0$ の一通り．

問題Ⅳ-10 ［第２版，Ⅳ-問10と同一］

一次元の角井戸型のポテンシャルでは，V_0a^2 が正でありさえすれば束縛状態があることが§9［〃］で示され，また三次元の球対称の角井戸型のポテンシャルでは，$V_0a^2>\pi^2\hbar^2/8m$ のときに限って，束縛状態が存在することが§15［〃］で示されている．同様のことは二次元の円対称な角井戸型のポテンシャルではどうなるか？　また，この結果に物理的意味をつけるとしたらどういうことになるか？

〔**解**〕 エネルギーレベル $-E$ に対する二次元 Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+V(x,y)\right]\psi(x,y)=-E\psi(x,y) \tag{1}$$

を極座標 r,θ：

$$\begin{cases} x=r\cos\theta \\ y=r\sin\theta \end{cases} \qquad r\geq 0,\ 2\pi>\theta\geq 0$$

で書くと

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)+V(r\,,\,\theta)\right]\psi(r\,,\,\theta)=-E\psi(r\,,\,\theta) \tag{2}$$

となる．題意より

$$V(r\,,\,\theta)=V(r)=\begin{cases} -V_0, & r<a \\ 0\ , & r>a \end{cases}$$

である．$\psi(r,\theta)$ を Fourier 級数に展開して

$$\psi(r\,,\,\theta)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}R_n(r)e^{in\theta} \tag{3}$$

とおくと（2）は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+V(r)\right]R_0(r)=-ER_0(r), \tag{4}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2}{r^2}\right]R_n(r)=-ER_n(r), \quad n\neq 0 \tag{5}$$

となる．（5）では遠心力ポテンシャル（$\hbar^2/2m\cdot n^2/r^2$）が存在して束縛状態が（4）に比べてできにくいから，（4）を考察する．

（4）を具体的に書けば

$$\frac{d^2}{dr^2}R_0(r)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}R_0(r)+\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)R_0(r)=0, \quad r<a. \tag{6}$$

$$\frac{d^2}{dr^2}R_0(r)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}R_0(r)-\frac{2m}{\hbar^2}ER_0(r)=0, \quad r>a. \tag{7}$$

（6）で

$$\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\right]^{1/2}=\alpha\ (>0)$$

とおくと $r=0$ で有限な解は

$$R_0(r)=J_0(\alpha r). \tag{8}$$

また（7）で

$$\left[\frac{2m}{\hbar^2}E\right]^{1/2}=\beta\ (>0)$$

とおくと $r \to \infty$ で零になる解は

$$R_0(r) = K_0(\beta r). \tag{9}$$

$r = a$ における連続条件は，公式集 p. 159

$$J_0'(z) = -J_1(z),$$

および p. 173

$$K_0'(z) = -K_1(z)$$

より，

$$\frac{\alpha J_1(\alpha a)}{J_0(\alpha a)} = \frac{\beta K_1(\beta a)}{K_0(\beta a)}.$$

$\alpha a = \xi$, $\beta a = \eta$ とおくと，これは

$$\frac{\xi J_1(\xi)}{J_0(\xi)} = \frac{\eta K_1(\eta)}{K_0(\eta)}, \quad \xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \tag{10}$$

となる．$V_0 a^2$ が小さいとき (10) を満たす ξ, η が存在するかどうかを調べる．そのとき ξ も η も小さくなるから，公式集 p. 145

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (z/2)^{2n}}{n!\,\Gamma(\nu+n+1)} \qquad [z \neq \text{負の実数}],$$

および p. 171

$$I_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2n}}{n!\,\Gamma(\nu+n+1)} \qquad [z \neq \text{負の実数}],$$

$$K_n(z) = (-1)^{n+1} I_n(z)\left(\gamma + \log\frac{z}{2}\right) + \frac{(-1)^n}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{n+2k}}{k!\,(n+k)!}\left[\sum_{m=1}^{k} \frac{1}{m} + \sum_{m=1}^{k+n} \frac{1}{m}\right] + \frac{1}{2} \sum_{r=0}^{n-1} (-1)^r \frac{(n-r-1)!}{r!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2r-n}$$

を用いると，$z \sim 0$ のとき

$$J_0(z) \sim 1, \quad J_1(z) \sim \frac{z}{2}, \quad K_0(z) \sim -\log z, \quad K_1(z) \sim \frac{1}{z}$$

を得るから (10) は $V_0 a^2$ が小さいとき

$$\frac{\xi^2}{2} = -\frac{1}{\log \eta}, \quad \text{つまり} \quad \eta = e^{-2/\xi^2}$$

となる．原点を通る解が存在するから $V_0 a^2$ がいくら小さくても束縛状態ができる．

一次元の場合も V_0a^2 がいくら小さくても束縛状態ができるが，二次元ではポテンシャルを深く（もっと厳密には V_0a^2 を大きく）しても束縛状態のエネルギーレベル（もっと厳密には Ea^2）がなかなか下がらないのに対して，一次元ではすみやかに下がる．一次元に比べて二次元では次元による自由度が増すから，浅いポテンシャルに閉じ込めにくくなり（あちら押えりゃこちらが上る），三次元になるともっと自由度が増して，ポテンシャルがある程度深くないと（$2mV_0a^2/\hbar^2>\pi^2/4$）閉じ込めることができない．

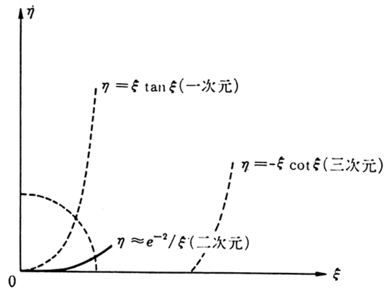


図　11

〔注意〕　方程式（５）が束縛状態を持つためには

$$\frac{2m}{\hbar^2}V_0a^2>(j_{n-1,1})^2$$

でなければならない．ここに $j_{n-1,1}$ は J_{n-1} の零でない最初の零点である．（問題IV-6参照）

問題IV-11　［第２版，IV-問11と同一］

ある固定軸の回りを回転させられている剛体に対する Schrödinger の方程式は，この軸に関する慣性能率を I とすると

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

となる．ただし，$\psi(\phi,t)$ は時間 t と，この軸の回りの回転角 ϕ との関数である．この方程式の解にはどんな境界条件を適用しなければならないか？規格化されたエネルギー固有関数と固有値とを見出せ．縮退は存在するか？

〔解〕　方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

の解は $\psi=u(\phi)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ とおけば，

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2u}{d\phi^2}=Eu$$

したがって

$$u(\phi)=Ae^{\pm i\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\phi}$$

つまり

$$\psi(\phi,t)=Ae^{\pm i\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\phi}\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

境界条件として，周期条件 $\psi(0,t)=\psi(2\pi,t)$ を課すと

$$\pm\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\cdot 2\pi=2n\pi$$

したがってエネルギー準位は

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2I}n^2 \qquad (n=0,\pm1,\pm2,\cdots\cdots)$$

規格化条件は，

$$|A|^2\int_0^{2\pi}u_n{}^*(\phi)u_n(\phi)d\phi=|A|^2\cdot 2\pi=1$$

したがって

$$A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$u_n(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\phi}$$

この解は，$n=0$ のとき縮退はないが，$n\neq0$ のとき，ある E_n に対して

$$n=\pm\sqrt{\frac{2IE_n}{\hbar^2}}$$

で与えられる固有値が2通りあるので2重に縮退している．これは古典論では左まわりと右まわりに対応している．

問題Ⅳ-12　［第2版，Ⅳ-問12と同一］

三次元の等方的な調和振動子（$V(r)=\frac{1}{2}Kr^2$）のエネルギー準位を，波動方程式を直交座標で解いて求めよ．それぞれの準位の縮退はどのようであるか？　またこの方程式は，球座標によっても円壔座標によっても分離でき

ることを示せ.

〔解〕（直 交 座 標） Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}Kr^2\right]u(\mathbf{r})=Eu(\mathbf{r}) \tag{1}$$

または

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}Kx^2\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}Ky^2\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}Kz^2\right)\right]u(x,y,z)=Eu(x,y,z)$$

ここで

$$u(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z) \tag{2}$$

として $u(x,y,z)$ を，それぞれ x,y,z のみの関数の積の形を仮定し，上の固有方程式に代入し両辺を XYZ で割ると結局

$$\frac{1}{X}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}Kx^2\right)X+\frac{1}{Y}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y}+\frac{1}{2}Ky^2\right)Y+\frac{1}{Z}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}Kz^2\right)Z=E \tag{3}$$

この式をみると右辺は定数，左辺はそれぞれ x,y,z の関数になっているが，各項は x,y,z に無関係な定数であることがでてくる．たとえば上の式を変形して

$$\frac{1}{X}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}Kx^2\right)X=E-\frac{1}{Y}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y}+\frac{1}{2}Ky^2\right)Y-\frac{1}{Z}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}Kz^2\right)Z$$

とすれば，左辺は x のみの関数，右辺は y,z の関数でありそれが等しいということから，この両辺は座標変数に無関係な定数でなければならない．同様の議論から（3）の左辺の各項は定数となるので，この定数をそれぞれ E_x,E_y,E_z とおくと

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}Kx^2\right)X=E_xX,\quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}Ky^2\right)Y=E_yY,$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}Kz^2\right)Z=E_zZ$$

$$E_x+E_y+E_z=E$$

が得られる．上の方程式は（13.1）［〃］と同じ形をしているので，同じ方法で解けて，エネルギー準位は（13.8）［〃］より

$$E_x=\left(n_x+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c,\quad E_y=\left(n_y+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c,\quad E_z=\left(n_z+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

$$n_x, n_y, n_z=0, 1, 2, \cdots\cdots,\qquad \omega_c=\sqrt{K/m}$$

が得られるので

$$E_{n_x, n_y, n_z}=E_x+E_y+E_z=\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega_c$$

規格化された波動関数 $u_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z)$ は（13.13）[13.17] の結果および上の（2）式から

$$u_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z)=N_{n_x}N_{n_y}N_{n_z}H_{n_x}(\alpha x)H_{n_y}(\alpha y)H_{n_z}(\alpha z)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x^2+y^2+z^2)} \tag{4}$$

である．ただし　$\alpha=\sqrt{m\omega_c/\hbar}$．

エネルギー状態の縮退は，あるエネルギー $E=(n+\frac{3}{2})\hbar\omega_c$ に対して $n_x+n_y+n_z=n$ だからある n_z に対して n_x, n_y のとり方は $(n-n_z+1)$ 通り，したがって全部で

$$\sum_{n_z=0}^{n}(n-n_z+1)=\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

だけの異なった状態がある．

（球　座　標）

（13.1）[13.3] と同様にして　$\rho=\alpha r,\ \lambda=\dfrac{2E}{\hbar}\sqrt{m/K}=\dfrac{2E}{\hbar\omega_c},\ \omega_c=\sqrt{K/m}$

とおくと，$u(\rho, \theta, \varphi)$ に対する方程式（1）は

$$\frac{\partial^2 u}{\partial\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\partial u}{\partial\rho}+(\lambda-\rho^2)u+\frac{1}{\rho^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial u}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 u}{\partial\phi^2}\right]=0$$

ここで

$$u(\rho, \theta, \phi)=R(\rho)Y(\theta, \phi)$$

とおけば，§14 の議論と同じようにして変数分離できて

$$Y(\theta, \phi)=Y_{lm}(\theta, \phi),\quad l=0, 1, 2, \cdots\cdots;\ m=0, \pm1, \pm2, \cdots\cdots, \pm l.$$

が得られ，$R(\rho)$ に対する微分方程式は

$$\frac{d^2}{d\rho^2}R+\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}R+\left[(\lambda-\rho^2)-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0 \tag{5}$$

となる．ところで（4）式を見ると解は（r の多項式）$\times e^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}$ の形をしているので，

$$R(\rho)=e^{-\frac{1}{2}\rho^2}f(\rho)$$

とおいて $R(\rho)$ の方程式に代入すると，$f(\rho)$ の満たすべき微分方程式

$$\frac{d^2}{d\rho^2}f(\rho)+\frac{2}{\rho}(1-\rho^2)\frac{d}{d\rho}f(\rho)+\left[\lambda-3-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]f(\rho)=0$$

が得られる．ここで (13.6) [〃] と同じようにして $f(\rho)$ を級数の形にし

$$f(\rho)=\rho^s\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\rho^\nu=\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\rho^{s+\nu}\qquad a_0\neq0,\ \ s\geq0$$

として $f(\rho)$ の方程式に代入すると，a_k についての関係式

$$[s(s+1)-l(l+1)]a_0=0 \tag{6}$$

$$[(s+1)(s+2)-l(l+1)]a_1=0 \tag{7}$$

$$[(s+\nu+2)(s+\nu+3)-l(l+1)]a_{\nu+2}=[2(s+\nu)-(\lambda-3)]a_\nu \tag{8}$$

が得られるが，（6）より $a_0\neq0$ だから

$$s=l,\ \ -(l+1)$$

$\rho=0$ $(r=0)$ での境界条件から $s\neq-(l+1)$ であることがわかるので $s=l$，したがって（7）から $a_1=0$．これと（8）より

$$a_1=a_3=a_5=\cdots\cdots=0$$

となるので零でないのは偶数項のみ．ところがこの級数が無限項までとすると，$f(\rho)$ は遠方での境界条件を満たさないことがわかるので，この級数はある有限項 $2k$ のところで切れて $a_{2k+2}=a_{2k+4}=\cdots\cdots=0$ でなければならない．これから（8）を使って

$$2(s+2k)-(\lambda-3)=0$$

または

$$\lambda=2(2k+l)+3$$

$\lambda=2E/\hbar\omega_c$ からエネルギー固有値は

$$E_{k,l}=\left(2k+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega_c\qquad k=0,1,2,\cdots\cdots;\ l=0,1,2\cdots\cdots \tag{9}$$

また

$$a_{2(\nu+1)}=\frac{2(\nu-k)}{(\nu+1)(2l+2\nu+3)}a_{2\nu}$$

から $f(\rho)$ は合流型超幾何関数であらわされ

$$f(\rho)=a_0\rho^lF\left(-k,\ l+\frac{3}{2}\ ;\ \rho^2\right)$$

となるが，ここで

$$a_0=\frac{\Gamma(k+l+\frac{3}{2})}{\Gamma(l+\frac{3}{2})k!}$$

ととると

$$f(\rho)=\rho^l L_k{}^{(l+\frac{1}{2})}(\rho^2) \tag{10}$$

となることがわかる．ただし Laguerre の多項式 $L_n{}^{(\alpha)}(x)$ は

$$L_n{}^{(\alpha)}(x)=\frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{\Gamma(\alpha+1)n!}F(-n,\alpha+1\,;x)$$

である（公式集 p. 96)．

結局規格化された波動関数は

$$u_{klm}(r,\theta,\phi)=M_{kl}(\alpha r)^l L_k{}^{(l+\frac{1}{2})}(\alpha^2 r^2)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{11}$$

規格化定数 M_{kl} は $L_n{}^{(\alpha)}(x)$ に対する直交関係（公式集 p. 98)

$$\int_0^\infty e^{-x}x^\alpha L_n{}^{(\alpha)}(x)L_m{}^{(\alpha)}(x)\,dx=\begin{cases}0 & (m\neq n)\\ \Gamma(\alpha+n+1)/n! & (m=n)\end{cases}$$

を使って

$$M_{kl}=\left[\frac{2k!\alpha^3}{\Gamma(k+l+\frac{3}{2})}\right]^{1/2}$$

である．

$E=(n+\frac{3}{2})\hbar\omega_c$ のエネルギーに対する縮退は与えられた l に対して，$(2l+1)$ 通りの m があるので

$$\sum_{k=0}^{[n/2]}[2(n-2k)+1]=\frac{(n+2)(n+1)}{2}$$

となって前の結果と一致する．（$[n/2]$ は $n/2$ を越えない最大の整数を表わす)．

（円 柱 座 標）

(r,ϕ,z) 座標系での固有方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]u+\frac{1}{2}K(r^2+z^2)u=Eu$$

$$u(r,\phi,z)=R(r)\Phi(\phi)Z(z) \tag{12}$$

として変数分離すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)-\frac{k^2}{r^2}\right]R+\frac{1}{2}Kr^2R=E_rR$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}Z+\frac{1}{2}Kz^2Z=E_zZ$$

$$\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi = -k^2\Phi$$

ただし $k, E_r, E_z(E_r+E_z=E)$ は変数分離の際現われる定数.

Z についての式は (13.1) [〃] と，また Φ についての式は (14.5) [〃] とそれぞれ同じなので (k は実数でしかも整数であることがわかり)

$$Z_{n_z}(z) = N_{n_z}H_{n_z}(\alpha z)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 z^2},$$

$$E_z = \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c \qquad n_z = 0, 1, 2, \cdots\cdots \tag{13}$$

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik\phi} \qquad k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots\cdots$$

動径方向 $R(r)$ に対する方程式は (13.1) [〃], (13.3) [〃] のときと同様にして

$\rho = \alpha r$, $\lambda = \dfrac{2E_r}{\hbar}\sqrt{m/k} = \dfrac{2E_r}{\hbar\omega_c}$, $\omega_c = \sqrt{K/m}$ とおくと

$$\frac{d^2}{d\rho^2}R + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}R + \left[(\lambda - \rho^2) - \frac{k^2}{\rho^2}\right]R = 0$$

となるので，球座標の場合と同じようにして級数展開すれば求まるが，上の式が (5) 式と形が似ていることに着目すれば前の結果が使える．すなわち

$$R(\rho) = \sqrt{\rho}\, G(\rho) \tag{14}$$

として $G(\rho)$ に対する方程式を求めると

$$\frac{d^2}{d\rho^2}G(\rho) + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}G + \left[(\lambda - \rho^2) - \frac{k^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2}\right]G = 0$$

が得られる．この式は (5) 式で l の代りに $|k| - \frac{1}{2}$ と置き換えたものと同じなので，(9)(10) に対応する式は

$$G(\rho) = \rho^{|k|-\frac{1}{2}}L_j^{(|k|)}(\rho^2)e^{-\frac{1}{2}\rho^2}, \qquad j = 0, 1, 2, \cdots\cdots$$

$$E_r = (2j + |k| + 1)\hbar\omega_c$$

となる．したがってエネルギー準位は

$$E_{j,n_z,k} = E_r + E_z = \left(2j + n_z + |k| + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_c$$

$$j = 0, 1, 2, \cdots\cdots,\quad n_z = 0, 1, 2, \cdots\cdots,\quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots\cdots$$

規格化された波動関数は，(12) (13) (14) より

$$u_{j,n_z,k}(r,\phi,z) = L_{jk}(\alpha r)^{|k|}L_j^{(|k|)}(\alpha^2 r^2)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}\cdot$$

$$\times N_{n_z}H_{n_z}(\alpha z)\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 z^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik\phi}$$

規格化定数 L_{jk} は球座標で M_{kl} を求めたと同様にして

$$L_{jk}=\left[\frac{2j!\,\alpha^2}{(j+|k|)!}\right]^{1/2} \quad (\because \Gamma(n+1)=n!)$$

エネルギーが $E=(n+\frac{3}{2})\hbar\omega_c$ のときの縮退度は，

$$\sum_{j=0}^{[n/2]}[2(n-2j+1)-1]=\frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

となって前の結果と一致する．

最後にそれぞれの座標形での波動関数の間の関係を書いておこう．

$E=\frac{3}{2}\hbar\omega_c$； この場合はすべて一致する．

$$u_{000}(x,y,z)=u_{000}(r,\theta,\phi)=u_{000}(r,\phi,z)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}$$

$E=\frac{5}{2}\hbar\omega_c$；この場合は三重の縮退でそれぞれの間の関係は次の通りである．

$$\begin{bmatrix} u_{0,1,1}(r,\theta,\phi) \\ u_{0,1,-1}(r,\theta,\phi) \\ u_{0,1,0}(r,\theta,\phi) \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_{1,0,0}(x,y,z) \\ u_{0,1,0}(x,y,z) \\ u_{001}(x,y,z) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} u_{001}(r,\phi,z) \\ u_{0,0,-1}(r,\phi,z) \\ u_{0,1,0}(r,\phi,z) \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_{100}(x,y,z) \\ u_{010}(x,y,z) \\ u_{001}(x,y,z) \end{bmatrix}$$

問題IV-13 ［第２版，IV-問13と同一］

水素原子の n 番目の量子状態における電子の位置エネルギーの期待値は $-Z^2e^2/a_0n^2$ であることを示せ． この結果から運動エネルギーの期待値を見出せ．

〔解〕 $V=-\dfrac{Ze^2}{r}$ だから

$$\langle V\rangle_n=\left\langle-\frac{Ze^2}{r}\right\rangle=\int u^*_{nlm}(r)\left(-\frac{Ze^2}{r}\right)u_{nlm}(r)d^3r$$

$$=\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi[R_{nl}(r)]^2\left(-\frac{Ze^2}{r}\right)Y^*_{lm}(\theta,\phi)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

θ,ϕ の積分は Y_{lm} の規格化から 1

$$=\int_0^\infty r^2dr[R_{nl}(r)]^2\left(-\frac{Ze^2}{r}\right)$$

$$=(-Ze^2)\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\int_0^\infty r^2dr\frac{1}{r}e^{-\rho}\rho^{2l}\{L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\}^2$$

$\rho=\dfrac{2Z}{na_0}r$　であるので

$$=(-Ze^2)\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\left(\frac{na_0}{2Z}\right)^2\int_0^\infty d\rho\,\rho^{2l+1}e^{-\rho}\{L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\}^2$$

この積分は Laguerre の随伴多項式の母関数を使って計算できるので（注参照）

$$=(-Ze^2)\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\left(\frac{na_0}{2Z}\right)^2\frac{[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}=-\frac{Z^2e^2}{a_0n^2}$$

したがって

$$\langle V\rangle_n=-\frac{Z^2e^2}{a_0n^2}$$

また

$$\langle E\rangle_n=E_n=\langle V\rangle_n+\langle T\rangle_n=-\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}$$

だから

$$\langle T\rangle_n=\langle E\rangle_n-\langle V\rangle_n=\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}$$

〔注〕 ここで Laguerre の随伴多項式を含んだ積分を計算しておこう．母関数 $U_p(\rho,s)$ は (16.21)［〃］で与えられるが，この式から

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{p+m}U_p(\rho,s)U_p(\rho,t)\,d\rho=\sum_{q=p}^\infty\sum_{r=p}^\infty\frac{s^qt^r}{q!r!}\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{p+m}L_q{}^p(\rho)L_r{}^p(\rho)d\rho$$

左辺は

$$\frac{(st)^p}{(1-s)^{p+1}(1-t)^{p+1}}\int_0^\infty\rho^{p+m}\,e^{-\rho\left(1+\frac{s}{1-s}+\frac{t}{1-t}\right)}\,d\rho$$

$$=\frac{(st)^p}{(1-s)^{p+1}(1-t)^{p+1}}\left[\frac{(1-s)(1-t)}{1-st}\right]^{p+m+1}(p+m)!$$

$$=(p+m)!(st)^p\left[\sum_{i=0}^m\binom{m}{i}(-s)^i\right]\left[\sum_{j=0}^m\binom{m}{j}(-t)^j\right]$$

$$\left[\sum_{k=p+m}^\infty\binom{k}{p+m}(st)^{k-p-m}\right]$$

$$=(p+m)!\,(st)^p\sum_{i=0}^{m}\sum_{j=0}^{m}\sum_{k=p+m}^{\infty}\binom{m}{i}\binom{m}{j}\binom{k}{p+m}(-s)^i(-t)^j(st)^{k-(p+m)}$$

ただし $\binom{m}{n}$ は二項係数である．

この結果をもとの式の右辺と比較することにより，$L_p{}^q(p)$ に関する積分の値が求まる．

まず $m=0$ として $s^q t^r$ の項を比較することにより，解答の中で使った式

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^p L_q{}^p(\rho)L_r{}^p(\rho)d\rho=\begin{cases}\dfrac{(q!)^3}{(q-p)!} & q=r\\ 0 & q\neq r\end{cases}$$

が得られる．また $m=1$ として同様のことを繰り返せば

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{p+1}L_q{}^p(\rho)L_q{}^p(\rho)\,d\rho=\frac{(q!)^3(2q-p+1)}{(q-p)!}$$

が得られるが，$p=2l+1$, $q=n+l$ と置き換えると，これは (16.23) [〃] に他ならぬことがわかる．

問題Ⅳ-14　［第2版，Ⅳ-問14と同一］

$n=2$, $m=0$ のときの放物線座標における規格化された水素原子の波動関数を見出せ．それらを球座標における $n=2$, $m=0$ のときの 波動関数であらわせ．

〔**解**〕 $n=2, m=0$ であるから，(16.38) [〃] により $(n_1=1,\ n_2=0)$, $(n_1=0,\ n_2=1)$ の二通りの場合がある．したがって波動関数は，

$$\begin{aligned}u_{100}(\xi,\eta,\phi)&=N_{100}e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}L_1(\alpha\xi)L_0(\alpha\eta)\\&=N_{100}e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}(1-\alpha\xi)\\u_{010}(\xi,\eta,\phi)&=N_{010}e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}L_0(\alpha\xi)L_1(\alpha\eta)\\&=N_{010}e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}(1-\alpha\eta)\end{aligned}$$

である．ただし $\alpha=\dfrac{\mu Ze^2}{2\hbar^2}$ で，N_{100}, N_{010} は規格化定数である．

なお (16.16) [〃]，(16.17) [〃] から $L_0(\rho)=1$, $L_1(\rho)=1-\rho$, であることを使った．

さて，(16.25) [〃] よりヤコビアンを計算して

$$r^2\sin\theta\, dr d\theta\, d\phi = \frac{1}{4}(\xi+\eta) d\xi d\eta d\phi$$

が得られるので，規格化積分は，

$$\int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\eta \int_0^{2\pi} d\phi\, u^*{}_{100}(\xi,\eta,\phi) u_{100}(\xi,\eta,\phi) \frac{1}{4}(\xi+\eta)$$

$$= |N_{100}|^2 \frac{2\pi}{4} \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\eta\, e^{-\alpha(\xi+\eta)}(1-\alpha\xi)^2(\xi+\eta)$$

$\alpha\xi = x$, $\alpha\eta = y$ とおいて

$$= |N_{100}|^2 \frac{\pi}{2\alpha^3} \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy\, e^{-x} e^{-y}(1-x)^2(x+y) = |N_{100}|^2 \times \frac{2\pi}{\alpha^3}$$

したがって

$$N_{100} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2\pi}}$$

同様にして

$$N_{010} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2\pi}}$$

以上から規格化された波動関数として

$$u_{100}(\xi,\eta,\phi) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}(1-\alpha\xi) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2\pi}} e^{-\alpha r}(1-\alpha r+\alpha r\cos\theta)$$

$$u_{010}(\xi,\eta,\phi) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}(1-\alpha\eta) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2\pi}} e^{-\alpha r}(1-\alpha r-\alpha r\cos\theta)$$

が得られる．

一方球座標での波動関数は，(16.24) [〃] および $n=2$ であるから $l=1,0$ であることを考慮して，

$$u_{200}(r,\theta,\phi) = R_{20}(r) Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2}(1-\alpha r) e^{-\alpha r}$$

$$u_{210}(r,\theta,\phi) = R_{21}(r) Y_{10}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} \cdot \alpha r e^{-\alpha r}\cos\theta$$

$$u_{21\pm1}(r,\theta,\phi) = R_{21}(r) Y_{1\pm1}(\theta,\phi) = \mp\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \alpha^{3/2} \cdot \alpha r\, e^{-\alpha r}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$$

が得られるので

$$u_{100}(\xi,\eta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_{200}(r,\theta,\phi) + u_{210}(r,\theta,\phi)]$$

$$u_{010}(\xi,\eta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_{200}(r,\theta,\phi) - u_{210}(r,\theta,\phi)]$$

なお $u_{21\pm1}(r,\theta,\phi)$ は放物線座標での波動関数 $u_{00\pm1}(\xi,\eta,\phi)$ に対応し

$$u_{00\pm1}(\xi,\eta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\alpha^{5/2}e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}(\xi\eta)^{1/2}e^{\pm i\phi}=\mp u_{21\pm1}(r,\theta,\phi)$$

の関係がある.

問題Ⅳ-15　[第2版, Ⅳ-問15と同一]

放物線座標における水素原子の波動関数にパリティがあればそれを論ぜよ.

〔**解**〕 放物線座標での波動関数は

$$u_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)=e^{-\frac{1}{2}\alpha(\xi+\eta)}(\xi\eta)^{\frac{1}{2}|m|}L^{|m|}_{n_1+|m|}(\alpha\xi)L^{|m|}_{n_2+|m|}(\alpha\eta)e^{im\phi}$$

である. この関数が空間反転 $(x,y,z)\longrightarrow(-x,-y,-z)$ でどのように変化するかを調べるわけであるが, このとき

$$(r,\theta,\phi)\longrightarrow(r,\pi-\theta,\phi\pm\pi)$$

であるから (16.25) [〃] により

$$(\xi,\eta,\phi)\longrightarrow(\eta,\xi,\phi\pm\pi)$$

である. したがって

$$u_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)\longrightarrow(-1)^m u_{n_2,n_1,m}(\xi,\eta,\phi)$$

なる変換をうける. これは定まったパリティを持っていない. ここで

$$u^{(+)}{}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)\equiv u_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)+u_{n_2,n_1,m}(\xi,\eta,\phi)$$

$$u^{(-)}{}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)\equiv u_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)-u_{n_2,n_1,m}(\xi,\eta,\phi)$$

なる一次結合を考えれば, これらは空間反転に対して

$$u^{(+)}{}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)\longrightarrow(-1)^m u^{(+)}{}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)$$

$$u^{(-)}{}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)\longrightarrow(-1)^{m+1}u^{(-)}{}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\phi)$$

となって定まったパリティをもつ.

第 V 章

連続固有値：衝突の理論

問題V－1 ［第2版，V-問1と同一］

一次元の角井戸型ポテンシャル（$V_0<0$ ということを除けば第14図［〃］に同じ）による散乱係数は，方程式（17.5）［〃］で，そこの V_0 自身および α の表式中の V_0 の符号を変えたものによって与えられることを示せ．また同じ場合について，透過係数の E による変化をしらべよ．

〔**解**〕 ポテンシャルの外側での Schrödinger 方程式の解は（17.1）［〃］と同じく，$k=+(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ とおいて

$$u(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, \qquad x\leq 0$$

$$u(x)=Ce^{ikx}, \qquad x\geq a$$

で与えられる．この場合は常に $E(\geq 0)>-V_0$ であるから，ポテンシャルの内側での波動関数は $\alpha=[2m(E+V_0)/\hbar^2]^{1/2}$ とおいて，(17.3)［〃］と同様に

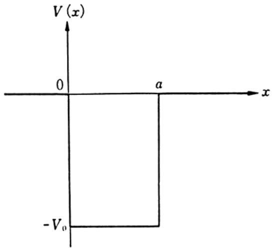


図 12

$$u(x)=Fe^{i\alpha x}+Ge^{-i\alpha x}$$

で与えられる．$x=0$ および a での u および du/dx の連続性より F と G とを消去すると，このポテンシャルによる反射係数および透過係数は

$$\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left[1+\frac{4E(E+V_0)}{V_0{}^2\sin^2\alpha a}\right]^{-1}$$

$$\left|\frac{C}{A}\right|^2=\left[1+\frac{V_0{}^2\sin^2\alpha a}{4E(E+V_0)}\right]^{-1}$$

となる．これは（17.5）［〃］式で V_0 の符号を変えたものになっている．

次に透過係数 $|C/A|^2$ がエネルギー E にどのように依存しているかを調べるために，図15と同じく $mV_0a^2/\hbar^2=8$ とし，$E/V_0=s$，$|C/A|^2=t(s)$ とおくと

$$t(s)=\left[1+\frac{\sin^2 4\sqrt{1+s}}{4s(1+s)}\right]^{-1}$$

となる．s が小さいときは

$$t(s)\simeq\frac{4}{\sin^2 4}\cdot s-\frac{4}{\sin^2 4}\left(\frac{4}{\sin^2 4}-1+4\cot 4\right)\cdot s^2\sim 7.0s(1-9.4s)$$

であり，また $t(s)=1$ となるのは $s=(n/4)^2\cdot\pi^2-1$ $(n\geq 2)$ のときである．s が10までの $t(s)$ のグラフは下図のごとくである．

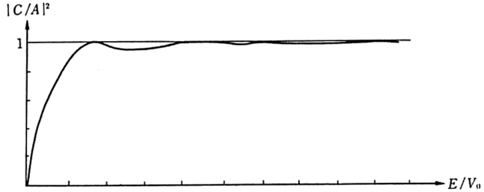


図　13

問題V－2　［第2版，V-問2と同一］

もし γ が (18.5)［〃］で与えられるならば，一般の二体の衝突に対して方程式 (18.4)［〃］と (18.7)［〃］が成り立つことを示せ．ただしエネルギーと質量の保存則を利用すること．

〔解〕 実験室系において静止している質量 m_2 の粒子に質量 m_1 の粒子が速度 v で衝突し，質量 m_3 の粒子が速度 v_1 で出て行くものとする．m_1 と m_2 との重心は速度 $m_1 v/(m_1+m_2)\equiv v'$ で動いており，上の反応を m_1 と m_2 との重心系で見て質量 m_3 の粒子が速度 v'' で出て行くとすると $v''=v_1-v'$ であるから，第20図(c)［第16図(c)］はそのまま成り立つ．したがって (18.3)［〃］：

$$v''\cos\theta+v'=v_1\cos\theta_0,$$
$$v''\sin\theta=v_1\sin\theta_0,$$
$$\phi=\phi_0$$

が使えて，これより

$$\tan\theta_0=\frac{\sin\theta}{\gamma+\cos\theta},\quad \gamma=\frac{v'}{v''} \qquad (1)$$

を得る．これは（18.4）[〃] で第二式の最後の等式を除いたものである．

運動量の保存則により重心系での質量 m_4 の粒子の速度は $-(m_3/m_4)\cdot\boldsymbol{v}''$ であるから，エネルギー保存則を用いて

$$\frac{1}{2}m_3v''^2+\frac{1}{2}m_4\left(\frac{m_3}{m_4}v''\right)^2=E+Q.$$

これより

$$v''=\left(\frac{m_4}{m_3}(E+Q)\frac{2}{m_3+m_4}\right)^{1/2}. \qquad (2)$$

一方

$$v'=\frac{m_1}{m_1+m_2}v=\left(\frac{m_1}{m_2}\cdot E\cdot\frac{2}{m_1+m_2}\right)^{1/2} \qquad (3)$$

であり，質量の保存則より $m_1+m_2=m_3+m_4$ であるから

$$\gamma=\frac{v'}{v''}=\left(\frac{m_1m_3}{m_2m_4}\cdot\frac{E}{E+Q}\right)^{1/2} \qquad (4)$$

となり（18.5）[〃] と一致する．

問題V-3　［第2版，V-問3と同一］

質量 m_1 の粒子が最初静止している質量 m_2 の粒子と弾性的に衝突した場合，すべての反跳粒子（質量 m_2）は実験室系では前方の半球内に散乱されることを示せ．また，もし，角分布が重心系で球対称であるならば，実験室系での粒子 m_2 に対する角分布はどうなるか？

〔解〕 弾性散乱であるから $Q=0$ であり，また衝突後注目している粒子は質量 m_2 の粒子であるから，前問（4）式に $m_3=m_2$，$m_4=m_1$，$Q=0$ を代入して

$$\gamma=1$$

を得る．これを前問の（1）式に代入して

$$\tan\theta_0=\frac{\sin\theta}{1+\cos\theta}=\tan\frac{\theta}{2},$$

つまり $\theta_0=\theta/2$ となるから，実験室系での m_2-粒子の散乱角 θ_0 は0から $\pi/2$ までの値しかとれない．これより前半球にのみ散乱されることがわかる．

またこのとき

$$\sigma_0(\theta_0,\phi_0)=4\cos\theta_0\sigma(2\theta_0,\phi_0)$$

であり，重心系での角分布が球対称なら $\sigma(2\theta_0,\phi_0)$ は一定（$\equiv C$）となるから実験室系での m_2 の角分布は

$$\sigma_0(\theta_0,\phi_0)=4C\cos\theta_0,\quad 0\leq\theta_0\leq\pi/2$$

で与えられる．

問題V-4　［第2版，V-問4と同一］

散乱ポテンシャルの外部（必ずしも漸近領域とは限らぬ）での，散乱波動関数（19.1）［〃］を平面波と第一種の球面 Hankel 関数（方程式（15.12）［〃］を見よ）の和として表わせ．この表式と方程式（15.13）［〃］についての議論を使って，漸近領域の内側においても，散乱波は純粋に外向きの波であることを示せ．

〔解〕 $r\geq r_0$ で $U(r)=0$ として，(19.2)［〃］を，この領域で解くと

$$R_l(r)\equiv\frac{\chi_l(r)}{r}=a_l j_l(kr)+b_l n_l(kr) \tag{1}$$

となる．ただし a_l, b_l は定数．平面波は（19.9）［〃］と部分波分解されるから (1) を

$$j_l(kr)+\{(a_l-1)j_l(kr)+b_l n_l(kr)\} \tag{2}$$

と書き直し，この第一項を（18.10）［〃］の右辺の第一項からくるものと見なせば，少なくとも，$r\to\infty$ で（2）の第二項は（18.10）［〃］の第二項を部分波分解したものに対応しなければならない．したがって

$$(a_l-1)j_l(kr)+b_l n_l(kr)=c_l\frac{e^{ikr}}{r}\quad(r\to\infty) \tag{3}$$

を得る．(15.12)［〃］，(15.13)［〃］を用いると（3）より

$$b_l=i(a_l-1)=-ki^l c_l$$

となるから $r\geq r_0$ で散乱波動関数 $u(r,\theta)$ は（19.1）［〃］*) より

$$u(r,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l R_l(r)P_l(\cos\theta)$$
$$=e^{ikr\cos\theta}+\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^{2l+1}\cdot c_l\cdot kh_l^{(1)}(kr)P_l(\cos\theta) \tag{4}$$

*) 第二版の［19.1］式では $i^l R_l(r)$ のかわりに $R_l(r)$ と書いているから，上の式を少し変えねばならない．

で与えられる．公式集 p. 166

$$h_n^{(1)}(z)=(-i)^{n+1}\frac{e^{iz}}{z}\sum_{r=0}^{n}\frac{(n+r)!}{r!(n-r)!}\left(\frac{i}{2z}\right)^r$$

より，$h_l^{(1)}(kr)$ は外向きの球面波をあらわしていることがわかるから $u(r,\theta)$ の第二項，つまり散乱波は $r\to\infty$ のみでなく $r\geq r_0$ ですでに純粋に外向きの波となっている．

問題V-5 ［第3版］

2個の物体 A, B は，不規則な形をしているが，その大きさおよび形とも同一であるとする．物体 A はプラス無限大（すなわち非透過性）のポテンシャルで満たされており，質量 m の粒子が A によって散乱される．物体 B は金属でつくられており，他の物体から絶縁されたときの静電気容量 C をもつ．物体 A による質量 m の粒子の弾性散乱に対する微分および全断面積の表式を，物体 B の容量 C を使って $k\to 0$ の極限で導け．

〔解〕 予備的な計算として A, B が半径 a の球体である場合を調べる．このとき物体 B の電気容量 C は

$$C=a \tag{1}$$

で与えられる．一方透過不能な物体 A による散乱振巾の $k\to 0$ での値は（19.11）［〃］および（19.21）［〃］より S 波（$l=0$ の波）しか寄与せず

$$f(\theta)=-a \tag{2}$$

となる．したがって（19.12）［〃］および（19.13）［〃］より

$$f(\theta)=-C,\quad \sigma(\theta)=C^2,\quad \sigma=4\pi C^2 \tag{3}$$

を得る．電気容量や散乱振巾は遠くから B あるいは A を眺めて決まる量であるから，A, B の形にはあまり関係せず両者が同じ形をしているということが本質的であり，(3) は球以外の形に対しても成り立つことが予想される．

もっと一般の場合を考える．まず導体 B が真空内に占める領域を D とする．電磁気学の教えるところによれば，導体 B に電荷を与えると真空 $R^3\backslash D$（D の余空間）に静電場が生じ，そのポテンシャル $u(\mathbf{r})$ は

$$\begin{cases}\Delta u(\mathbf{r})=0, & \mathbf{r}\in R^3\backslash D\\ u(\mathbf{r})=q\ (\text{定数}), & \mathbf{r}\in\partial D\ (D\ \text{の境界})\\ \lim_{r\to\infty}u(\mathbf{r})=0\end{cases} \tag{4}$$

の解として与えられる．（4）は外部 Dirichlet 問題とよばれ，∂D が十分滑らかな閉曲面であれば（したがって不規則な形といっても限度がある）一意的な解をもち，その漸近的な振舞いは

$$u(\mathbf{r})=O\left(\frac{1}{r}\right),\quad r\to\infty \tag{5}$$

となる．このとき導体 B の全電荷 e は

$$e=\lim_{r\to\infty} ru(\mathbf{r}) \tag{6}$$

で与えられ，電気容量 C は

$$C=e/q$$

となる．

一方 B と同じ形をした物体 A が透過不能な場合，この物体とある粒子との弾性散乱振巾 $f(\theta,\varphi)$ は

$$\begin{cases}\Delta\psi(\mathbf{r})+k^2\psi(\mathbf{r})=0, & \mathbf{r}\in R^3\backslash D \quad (\text{Schrödinger 方程式})\\ \psi(\mathbf{r})=0 & ,\ \mathbf{r}\in\partial D \quad (\text{境界条件})\\ \lim\limits_{r\to\infty}\psi(\mathbf{r})=e^{ikz}+\dfrac{f(\theta,\phi)}{r}e^{ikr}, & (\text{漸近条件})\end{cases} \tag{8}$$

より求まる．（8）は $\psi(\mathbf{r})-e^{ikz}=\varphi(\mathbf{r})$ とおくと

$$\begin{cases}\Delta\varphi(\mathbf{r})+k^2\varphi(\mathbf{r})=0, & \mathbf{r}\in R^3\backslash D\\ \varphi(\mathbf{r})=-e^{ikz} & ,\ \mathbf{r}\in\partial D\\ \lim\limits_{r\to\infty}\varphi(\mathbf{r})=\dfrac{f(\theta,\phi)}{r}e^{ikr}\end{cases} \tag{8$'$}$$

となる．(8)$'$ は Helmholtz の方程式の境界値問題に Sommerfeld の放射条件

$$\varphi(\mathbf{r})=O\left(\frac{1}{r}\right),\quad \frac{\partial\varphi(\mathbf{r})}{\partial r}-ik\varphi(\mathbf{r})=o\left(\frac{1}{r}\right),\quad r\to\infty$$

を課したもので，∂D が十分滑らかな閉曲面である場合，解は一意的である．ここで $k\to 0$ の極限をとると（この極限の微妙さは無視して）$\lim_{k\to 0}\varphi(\mathbf{r})\equiv u_0(\mathbf{r})$ は

$$\begin{cases}\Delta u_0(\mathbf{r})=0, & \mathbf{r}\in R^3\backslash D\\ u_0(\mathbf{r})=-1, & \mathbf{r}\in\partial D\\ \lim\limits_{r\to\infty} u_0(\mathbf{r})=0\end{cases} \tag{9}$$

を満たし，これは（4）で $q=-1$ とおいたものに一致する．したがって

$$u_0(\mathbf{r})=-u(\mathbf{r})/q$$

となり

$$\lim_{k\to 0} f(\theta,\phi)=\lim_{r\to\infty} ru_0(\mathbf{r})=-\frac{1}{q}\lim_{r\to\infty} ru(\mathbf{r})=-\frac{e}{q}=-C \tag{10}$$

を得るからやはり（3）が成り立つことがわかる.

問題V-6　［第2版，V-問9と同一］

$A>0$ として，散乱ポテンシャル $V(r)=A/r^2$ によって生じる位相のずれの一般公式をつくれ．全断面積は有限になるか？　もし有限にならないとすれば，その発散は小さい角の散乱に起因するか，大きな角の散乱に起因するか，またその理由は？　もし $A<0$ とすれば，この場合の計算にはどのような変更が必要になるか？　$A<0$ の場合の計算には何らかの困難な事情が起こってくるであろうか？

〔**解**〕 l 波の動径部分波動関数 R_l に対する Schrödinger 方程式は

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-\frac{A}{r^2}\right]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R_l=0. \tag{1}$$

$A>0$ のとき，$2\mu A/\hbar^2=\beta^2$，$2\mu E/\hbar^2=k^2$，$kr=\rho$ とおくと（1）は

$$\frac{d^2R_l}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR_l}{d\rho}+\left[1-\frac{\beta^2+l(l+1)}{\rho^2}\right]R_l=0 \tag{2}$$

となる．$\alpha(\alpha+1)=\beta^2+l(l+1)$ で α を定義すれば，この方程式は（15.4）［〃］で l を α に置き換えたものに一致するから（2）の解は

$$j_\alpha(\rho)\equiv\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}}J_{\alpha+\frac{1}{2}}(\rho) \tag{3}$$

で与えられる．公式集 p.145

$$J_\nu(z)=\left(\frac{z}{2}\right)^\nu\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n(z/2)^{2n}}{n!\,\Gamma(\nu+n+1)}$$

より

$$\lim_{r\to 0} j_\alpha(kr)=\sqrt{\pi}\cdot\frac{1}{2^{\alpha+1}\Gamma(\alpha+3/2)}\cdot(kr)^\alpha \tag{4}$$

を得る．$\alpha(\alpha+1)=\beta^2+l(l+1)$ を α について解くと

$$\alpha_\pm=-\frac{1}{2}\pm\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\beta^2}$$

となり，（2）の一次独立な二つの解は $j_{\alpha+}(\rho)$ と $j_{\alpha-}(\rho)$ である．（$\sqrt{(l+1/2)^2+\beta^2}$

が整数なら $j_{\alpha+}(\rho)$ と $j_{\alpha-}(\rho)$ とは一次従属となり $j_{\alpha+}(\rho)$ と $n_{\alpha+}(\rho)$ とが一次独立な解となる.）$\alpha_+>0$, $\alpha_-<-1$ であるから,（4）の振舞いを考慮して, 波動関数として採用すべき解は $\sqrt{(l+1/2)^2+\beta^2}$ が整数か否かにかかわらず $j_{\alpha+}(kr)$ である. 公式集 p.154

$$J_\nu(z)\sim\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z-\frac{(2\nu+1)\pi}{4}\right),\quad |z|\to\infty$$

より

$$R_l(r)=j_{\alpha+}(kr)\sim\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{1}{2}\alpha_+\pi\right),\quad r\to\infty$$

となるから,（19.8）[〃]を用いて l 波の位相のずれ δ_l は

$$\delta_l=\frac{\pi}{2}(l-\alpha_+)=-\frac{\pi}{2}\left[\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\beta^2}-\left(l+\frac{1}{2}\right)\right] \tag{5}$$

で与えられる（k に依存していない！）. これを (19.11)[〃] に代入して散乱振巾 $f(\theta)$ を求めると $\lim_{l\to\infty}(2l+1)\delta_l=-\pi\beta^2/2$ および Legendre の多項式の性質より, 前方 $(\theta=0)$ において $f(\theta)$ が発散することが予想されるから, $f(\theta)$ を $0\leq\theta\leq\pi$ で有限な部分と $\theta=0$ で発散する部分に分ける. 初等的な計算により

$$f(\theta)-\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[-\frac{\pi}{2}\frac{\beta^2}{2l+1}+i\times\frac{\pi^2}{4}\frac{\beta^4}{(2l+1)^2}\right]P_l(\cos\theta)$$

の絶対値は $0\leq\theta\leq\pi$ で有限になることがわかる. 公式集 p.117

$$\frac{1}{\sqrt{\cos\alpha-\cos\theta}}=\sqrt{2}\sum_{n=0}^{\infty}\cos\left(\left(n+\frac{1}{2}\right)\alpha\right)P_n(\cos\theta)\quad [0\leq\alpha<\theta<\pi]$$

で $\alpha=0$ とおくことにより

$$\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta)=\frac{1}{2\sin(\theta/2)},\quad 0<\theta<\pi,$$

また公式集 p.117

$$P_\nu(x)=\frac{\sin\nu\pi}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left[\frac{1}{\nu-n}-\frac{1}{\nu+n+1}\right]P_n(x)$$

$$[\nu\neq \text{整数},\ -1<x\leq 1]$$

で, $\nu=-1/2$, $x=-\cos\theta$ とおき $P_n(-\cos\theta)=(-1)^nP_n(\cos\theta)$ を用いると

$$\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{2l+1}P_l(\cos\theta)=\frac{\pi}{4}P_{-\frac{1}{2}}(-\cos\theta),\quad 0<\theta\leq\pi$$

となるから

$$f(\theta)=-\frac{\pi\beta^2}{2k}\frac{1}{2\sin(\theta/2)}+i\times\frac{\pi^3\beta^4}{16k}P_{-\frac{1}{2}}(-\cos\theta)$$
$$+(0\leq\theta\leq\pi \text{ で有限な項}) \tag{6}$$

を得る．公式集 p. 104

$$P_\nu(-1+2x)\sim(1/\pi)\sin\nu\pi\log x,\ [x>0,\ x\to 0]$$

より

$$P_{-\frac{1}{2}}(-\cos\theta)\sim-(2/\pi)\log\theta,\ \theta\sim 0$$

となるから

$$\lim_{\theta\to 0}\theta f(\theta)=-\frac{\pi\beta^2}{2k},$$
$$\lim_{\theta\to 0}\frac{1}{-\log\theta}\cdot\frac{4\pi}{k}(\mathrm{Im}\,f(\theta))=\frac{\pi^3\beta^4}{2k^2} \tag{7}$$

を得る．したがって全散乱断面積（$=(4\pi/k)\mathrm{Im}f(\theta=0)$）は発散し，それは散乱振巾の少さな角度での発散が原因している．この発散は $\lim_{l\to\infty}(2l+1)\delta_l=-\pi\beta^2/2$，つまり位相のずれが大きい角運動量（≃大きい衝突径数）に対してもあまり早く零にならないということから生じており，ポテンシャル A/r^2 が長距離力であることを意味している．

$A<0$ の場合は β^2 を $-\beta^2$ に置き換えて

$$\alpha_\pm=-\frac{1}{2}\pm\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-\beta^2}$$

となり，根号の中がすべての l に対して正となるのは $1/4>\beta^2$ のときである．この場合 $\alpha_+>-1/2$, $\alpha_-<-1/2$ であるから原点において特異性の弱い解 $j_{\alpha+}(\rho)$ をとると，$A>0$ の場合と同様の議論ができて，散乱振巾は（6）で β^2 を $-\beta^2$ で置き換えた式で与えられる．一方 $1/4\leq\beta^2$ のときは少なくとも S 波（$l=0$ の波）に対しては $\alpha_\pm=-1/2\pm i\gamma$（$\gamma$：実数）となり，$j_{\alpha+}(\rho)$ と $j_{\alpha-}(\rho)$ とは原点において同じ特異性をもち，いずれを波動関数としてとるかの規準がないから位相のずれは定まらない．(Morse and Feshbach "Methods of Theoretical Physics" II (McGraw-Hill) p. 1665～7; Landau and Lifshitz "Quantum Mechanics" (English transl. Pergamon Press) §35; E. Nelson, Journal of Mathematical Physics **5**, 332 (1964) 参照)

問題V－7 ［第2版，V-問5と類似］

散乱断面積が零エネルギーで零であるためには（Ramsauer-Townsend 効果），三次元の井戸型ポテンシャルに対する V_0a^2 はいかなる値でなければならないか？ 小さな衝突エネルギーでの微分断面積および全断面積に対する表式中の主要項を求め，$l>2$ をもつ部分波は無視しうることに注意せよ．

〔**解**〕 入射エネルギーを E とし

$$\sqrt{\frac{2\mu V_0a^2}{\hbar^2}}=\eta,\quad \sqrt{\frac{2\mu Ea^2}{\hbar^2}}=ka=\epsilon$$

とおく．l 波の位相のずれ δ_l は（19.15）［〃］および（19.26）［〃］より

$$\tan\delta_l=\frac{\epsilon j_l'(\epsilon)j_l(\sqrt{\eta^2+\epsilon^2})-\sqrt{\eta^2+\epsilon^2}j_l(\epsilon)j_l'(\sqrt{\eta^2+\epsilon^2})}{\epsilon n_l'(\epsilon)j_l(\sqrt{\eta^2+\epsilon^2})-\sqrt{\eta^2+\epsilon^2}n_l(\epsilon)j_l'(\sqrt{\eta^2+\epsilon^2})}$$

で与えられる．これに（15.10）［〃］を用いると

$$\tan\delta_l=\frac{\sqrt{\eta^2+\epsilon^2}j_{l-1}(\sqrt{\eta^2+\epsilon^2})j_l(\epsilon)-\epsilon j_{l-1}(\epsilon)j_l(\sqrt{\eta^2+\epsilon^2})}{\sqrt{\eta^2+\epsilon^2}j_{l-1}(\sqrt{\eta^2+\epsilon^2})n_l(\epsilon)-\epsilon n_{l-1}(\epsilon)j_l(\sqrt{\eta^2+\epsilon^2})} \tag{1}$$

と変形される．ただし $l=0$ に対しては

$$j_{-1}(\rho)=-n_0(\rho),\quad n_{-1}(\rho)=j_0(\rho)$$

とする．$l=0$ で $\epsilon\ll1$（低い入射エネルギー）のとき（15.7）［〃］より

$$\tan\delta_0\approx\frac{\eta j_{-1}(\eta)-\epsilon\times\epsilon^{-1}j_0(\eta)}{-\eta j_{-1}(\eta)\epsilon^{-1}-\epsilon j_0(\eta)}=-\epsilon\times\frac{\eta j_{-1}(\eta)-j_0(\eta)}{\eta j_{-1}(\eta)+\epsilon^2j_0(\eta)}$$

となり，全散乱断面積が $\epsilon\to0$ で零になるためには $l=0$ からの寄与

$$\frac{4\pi}{\epsilon^2}a^2\sin^2\delta_0=4\pi a^2\frac{\tan^2\delta_0}{\epsilon^2}\cdot\frac{1}{1+\tan^2\delta_0}$$

が $\epsilon\to0$ で零になることが必要であり，このためには

$$\eta j_{-1}(\eta)-j_0(\eta)=-\eta j_1(\eta)=0, \tag{2}$$

つまり $\eta=\tan\eta$ でなければならない．$\eta>0$ であるから（2）を満たす η は j_1 の正の零点でなければならない．この零点の一つを η_0 とし，$\eta=\eta_0$ のときの $\tan\delta_l$ の $\epsilon\to0$ での振舞いを調べる．（公式集 p. 151 の Bessel 関数の零点の性質「n が正の整数ならば，$J_\nu(z)$ と $J_{\nu+n}(z)$ に共通な零点は $z=0$ 以外に存在しない」より $j_l(\eta_0)\neq0$, $l\neq1$ がわかる．）

$$\sqrt{\eta_0{}^2+\epsilon^2}=\eta_0+\frac{\epsilon^2}{2\eta_0}+O(\epsilon^4),$$

$$j_l(\sqrt{\eta_0{}^2+\epsilon^2})=j_l(\eta_0)+\frac{\epsilon^2}{2\eta_0}j_l'(\eta_0)+O(\epsilon^4),$$

および公式集 p. 168

$$j_n(z)=(2z)^n\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m(n+m)!}{m!(2n+2m+1)!}z^{2m},$$

$$n_n(z)=-\frac{1}{2^nz^{n+1}}\left[\sum_{m=0}^{n}\frac{(2n-2m)!}{m!(n-m)!}z^{2m}+(-1)^n\sum_{m=n+1}^{\infty}\frac{(-1)^m(m-n)!}{m!(2m-2n)!}z^{2m}\right]$$

より

$$j_l(\epsilon)=(2\epsilon)^l\left[\frac{l!}{(2l+1)!}-\frac{(l+1)!}{(2l+3)!}\epsilon^2+O(\epsilon^4)\right],\quad l=0,1,\cdots\cdots$$

$$n_l(\epsilon)=\begin{cases}-\dfrac{1}{\epsilon}\left[1-\dfrac{1}{2!}\epsilon^2+O(\epsilon^4)\right], & l=0\\[2ex] -\dfrac{1}{2^l\epsilon^{l+1}}\left[\dfrac{(2l)!}{l!}+\dfrac{(2l-2)!}{(l-1)!}\epsilon^2+O(\epsilon^4)\right], & l=1,2,\cdots\cdots\end{cases}$$

であるから，$l=0$ に対しては（1）より

$$\tan\delta_0\approx\frac{\left(\eta_0+\dfrac{\epsilon^2}{2\eta_0}\right)\left(j_{-1}(\eta_0)+\dfrac{\epsilon^2}{2\eta_0}j_{-1}'(\eta^0)\right)\left(1-\dfrac{1}{3!}\epsilon^2\right)-\epsilon\times\dfrac{1}{\epsilon}\left(1-\dfrac{1}{2!}\epsilon^2\right)\left(j_0(\eta_0)+\dfrac{\epsilon^2}{2\eta_0}j_0'(\eta_0)\right)}{-\eta_0j_{-1}(\eta_0)\times\epsilon^{-1}}$$

$$\approx-\epsilon\times\frac{\eta_0j_{-1}(\eta_0)-j_0(\eta_0)+\epsilon^2\left[-\dfrac{\eta_0j_{-1}(\eta_0)}{6}+\dfrac{j_{-1}(\eta_0)}{2\eta_0}+\dfrac{j_{-1}'(\eta_0)}{2}-\dfrac{j_0'(\eta_0)}{2\eta_0}+\dfrac{j_0(\eta_0)}{2}\right]}{\eta_0j_{-1}(\eta_0)}$$

となる．ここで（15.10）［〃］および $j_1(\eta_0)=0$ を用いて

$$\eta_0j_{-1}(\eta_0)=j_0(\eta_0)$$

$$j_0'(\eta_0)=-j_1(\eta_0)=0$$

$$j_{-1}'(\eta_0)=-\frac{1}{\eta_0}j_{-1}(\eta_0)-j_0(\eta_0)=-\left(\frac{1}{\eta_0{}^2}+1\right)j_0(\eta_0)$$

に注意すると

$$\lim_{\epsilon\to0}\frac{\tan\delta_0}{\epsilon^3}=-\frac{1}{6}\tag{3}$$

が得られる．同様にして $l=1$ のときは

$$\tan\delta_1\approx\frac{\eta_0j_0(\eta_0)2\epsilon\cdot(1/3!)}{\eta_0j_0(\eta_0)(-1/2\epsilon^2)\cdot2!}$$

となるから

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\tan\delta_1}{\epsilon^3}=-\frac{1}{3}. \tag{4}$$

$l=2$ については，$j_1(\eta_0)=0$ であるから（1）の分母の二項が同程度の大きさになることに注意して

$$\tan\delta_2=\frac{-\epsilon\cdot(2\epsilon/6)\cdot j_2(\eta_0)}{\eta_0(\epsilon^2/2\eta_0)j_1'(\eta_0)(-1/4\epsilon^3)\cdot 12-\epsilon\cdot(-1/2\epsilon^2)\cdot 2\cdot j_2(\eta_0)}$$

が得られ

$$j_1'(\eta_0)=\frac{1}{\eta_0}j_1(\eta_0)-j_2(\eta_0)=-j_2(\eta_0)$$

を用いると

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\tan\delta_2}{\epsilon^3}=-\frac{2}{15} \tag{5}$$

となる．$l\geq 3$ に対しては $j_{l-1}(\eta_0)\neq 0$ であるから $\tan\delta_l=0(\epsilon^{2l+1})$ となり $l\leq 2$ に比べて無視できる．

$$e^{2i\delta_l}-1=\frac{2i\tan\delta_l}{1-i\tan\delta_l}$$

であるから，(19.11) [〃] に（3），（4），（5）を代入すると散乱振巾 $f(\theta)$ は

$$f(\theta)\approx\frac{2i}{2ik}(ak)^3\left[-\frac{1}{6}+3\times\left(-\frac{1}{3}\right)P_1(\cos\theta)+5\times\left(-\frac{2}{15}\right)P_2(\cos\theta)\right]$$

$$=a^3k^2\left[\frac{1}{6}-\cos\theta-\cos^2\theta\right]$$

で与えられ，微分断面積 $\sigma(\theta)$ は (19.12) [〃] より

$$\sigma(\theta)\approx a^6k^4\left[\frac{1}{6}-\cos\theta-\cos^2\theta\right]^2 \tag{6}$$

となる．全断面積 σ は (19.13) [〃] および

$$\sin^2\delta_l=\frac{\tan^2\delta_l}{1+\tan^2\delta_l}$$

を用いると

$$\sigma\approx\frac{4\pi}{k^2}(ak)^6\left[\frac{1}{36}+3\times\frac{1}{9}+5\times\frac{4}{9\times 25}\right]$$

$$=4\pi a^6k^4\times\frac{9}{20} \tag{7}$$

となる．

以上のことから，$E=0$ $(k=0)$ のとき，$\eta=\eta_0$ であれば σ は零となることがわかる．したがって σ が零エネルギーで零であるための必要十分条件は

$$V_0a^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}\eta_0{}^2 \quad (\eta_0 \text{ は } j_1 \text{ の正の零点})$$

である．

問題V-8　［第2版，V-問6と同一］

方程式（19.31）［〃］を導き出すにあたっての仮定を明確に述べよ．そして，それが $l=0$ の波が共鳴している場合，低い衝突エネルギーでの全断面積に対するよい近似につながっていることを証明せよ．

〔解〕

仮定 1.　低エネルギー：$ka\ll 1$,

仮定 2.　$ka\ll(2\mu V_0a^2/\hbar^2)^{1/2}\equiv\alpha_0a$,

仮定 3.　低エネルギーで S 波（$l=0$）に共鳴状態がある：$\zeta_0=\alpha_0a\cot\alpha_0a\ll 1$.

仮定3より $\alpha_0a\approx(2n+1)\pi/2$ $(n=0,1,\cdots\cdots)$ が出るから，仮定2は仮定1と仮定3とから導ける．

$l\geq 1$ で低エネルギーに共鳴状態がなければ $\tan\delta_l=O\ ((ka)^{2l+1})$ となり，$ka\ll 1$ のとき S 波以外の全断面積への寄与は無視できる．このとき (19.13)［〃］および (19.29)［〃］より

$$\sigma\approx 4\pi\sigma_0\approx\frac{4\pi a^2}{(\alpha_0a\cot\alpha_0a-b_0k^2a^2)^2+(ka)^2}$$

$$\approx\frac{4\pi}{k^2+\alpha_0{}^2\cot^2\alpha_0a},$$

つまり（19.31）［〃］式を得る．

問題V-9　［第2版，V-問7と同一］

方程式(19.31)［〃］と第Ⅳ章の問題5の結果を利用して，ある特定のポテンシャルによる全断面積の衝突エネルギー E およびそのポテンシャル内での粒子の結合エネルギー ϵ による近似式をつくれ．ただし E および ϵ はいずれも V_0 に比べて小さいものとする．

〔解〕

$$\sqrt{\frac{2\mu\epsilon}{\hbar^2}a^2}=\eta,\ \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0-\epsilon)a^2}=\sqrt{\left(\alpha_0{}^2-\frac{2\mu\epsilon}{\hbar^2}\right)a^2}=\xi$$

とおくと S 波 ($l=0$) の束縛エネルギー ϵ は

$$\xi\cdot\cot\xi=-\eta,\ (\xi^2+\eta^2=\alpha_0{}^2a^2),$$

つまり

$$\sqrt{\alpha_0{}^2a^2-\eta^2}\cot\sqrt{\alpha_0{}^2a^2-\eta^2}=-\eta \tag{1}$$

の解より求まる．題意より $\epsilon\ll V_0$ がわかっているから $\eta\ll\alpha_0 a$ であり（1）は

$$\alpha_0 a\cot\alpha_0 a+O\left(\frac{\eta^2}{\alpha_0 a}\right)=-\eta$$

となる．$\eta\times(\eta/\alpha_0 a)\ll\eta$ に注意すると（1）を満たす η は

$$\eta\approx-\alpha_0 a\cot\alpha_0 a$$

で与えられることがわかる．これを (19.31) [〃] に代入して

$$\sigma\approx\frac{4\pi}{(2\mu/\hbar^2)E+(2\mu/\hbar^2)\epsilon}=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\frac{1}{E+\epsilon}$$

を得る．

問題V-10 ［第2版，V-問8と同一］

完全剛体球による散乱で $ka=\frac{1}{2}$ として，最初の三つの部分波 ($l=0,1,2$) を用いてその散乱の微分断面積を計算し，角度を横軸にとりグラフをつくれ．また，この場合の全断面積はどうなるか．三つの項のみを使った結果の大体の正確度はどの程度か？

〔解〕 l 波の位相のずれ δ_l は (19.20) [〃] より

$$\tan\delta_l=\frac{j_l(1/2)}{n_l(1/2)}$$

で与えられる．数表より

$$j_0(0.5)=0.9588,\quad j_1(0.5)=0.1625,\quad j_2(0.5)=0.1637\times10^{-1},$$

$$n_0(0.5)=-0.1755\times10,\quad n_1(0.5)=-0.4469\times10,\quad n_2(0.5)=-0.2506\times10^2.$$

$-\pi/2<\delta_l<\pi/2$ であるような δ_l を上式より求めると

$$\delta_0=-0.5000,\quad \delta_1=-0.3634\times10^{-1},\quad \delta_2=-0.6544\times10^{-3}.$$

微分断面積 $\sigma(\theta)$ で $l>2$ の波からの寄与を無視すると

$$\sigma(\theta)\approx 4a^2\times[(\cos\delta_0\sin\delta_0P_0(\cos\theta)+3\cos\delta_1\sin\delta_1P_1(\cos\theta)+5\cos\delta_2\sin\delta_2P_2(\cos\theta))^2 + (\sin^2\delta_0P_0(\cos\theta)+3\sin^2\delta_1P_1(\cos\theta)+5\sin^2\delta_2P_2(\cos\theta))^2] \tag{1}$$

となり

$$\sin\delta_0=-0.4794,\quad \sin\delta_1=-0.3634\times10^{-1},\quad \sin\delta_2=-0.6544\times10^{-3},$$
$$\cos\delta_0=0.8776,\quad \cos\delta_1=0.9993,\quad \cos\delta_2=1.000$$

より

$$\cos\delta_0\sin\delta_0=-0.4207,\quad \cos\delta_1\sin\delta_1=-0.3631\times10^{-1},\quad \cos\delta_2\sin\delta_2=-0.6544\times10^{-3}$$
$$\sin^2\delta_0=0.2299,\quad \sin^2\delta_1=0.1320\times10^{-2},\quad \sin^2\delta_2=0.4283\times10^{-6}$$

を（1）に代入して図示すると下図のようになる.

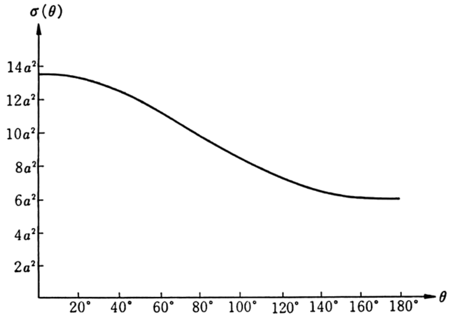


図　14

また全断面積も $l>2$ の項を無視すると

$$\sigma\approx16\pi a^2\sum_{l=0}^{2}(2l+1)\sin^2\delta_l=11.75a^2.$$

$l=3$ については

$$j_3(0.5)=0.1174\times10^{-2},\quad n_3(0.5)=-0.2461\times10^3$$

であるから

$$\tan\delta_3=-0.477\times10^{-5}.$$

一方（19.21）[〃] の右辺に $l=3$, $ka=1/2$ を代入すると

$$\tan\delta_3\approx-0.496\times10^{-5}$$

となり両者は大体一致している．したがって $l\leqq 2$ で切り捨てた誤差は

$$\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=3}^{\infty}(2l+1)\frac{2^{-4l-2}}{(2l+1)^2[(2l-1)!!]^4}\simeq 10^{-8}\times a^2$$

程度である．

問題V-11　［第3版］

ポテンシャル $V(r)=-V_0(1+i\xi)$, $r<a$; $V(r)=0$, $r>a$ による弾性散乱および吸収断面積を計算せよ．ただし，V_0 および ξ は正とする．なお，k および ξ は極めて小さく，かつ共鳴および Ramsauer-Townsend 効果はいずれも存在しないと仮定せよ．各断面積において，k および ξ についての主要項のみをとり出せ．

〔解〕（19.27）［〃］の一般式は，（15.7）［〃］を（19.15）［〃］に代入して

$$\tan\delta_l\approx\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}\cdot\frac{l-\gamma_l a}{l+1+\gamma_l a},\quad ka\ll 1. \tag{1}$$

Ramsauer-Townsend 効果が存在しないから

$$\gamma_0 a=O(1).$$

また零エネルギー付近に共鳴状態が存在しないから

$$l+1+\gamma_l a=O(1),\quad l=0,1,\cdots\cdots. \tag{2}$$

$$\left[\frac{2\mu[V_0(1+i\xi)+E]}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}=\alpha'$$

とおくと，（2）は

$$\frac{\alpha' a j_{l-1}(\alpha' a)}{j_l(\alpha' a)}=l+1+\gamma_l a=O(1) \tag{3}$$

と同等である．

$$k^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}E,\quad \alpha_0'=\left[\frac{2\mu V_0(1+i\xi)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

とおくと，題意より $k\ll|\alpha_0'|$ であるから

$$\alpha'\approx\alpha_0'+\frac{k^2}{2\alpha_0'}$$

となり（3）は

$$\frac{\alpha_0' a j_{l-1}(\alpha_0' a)}{j_l(\alpha_0' a)}=O(1),\quad l=0,1,2,\cdots\cdots,$$

つまり $l=0,1,2,\cdots$ に対し $\alpha_0'a$ は j_{l-1} の零点近くの値ではないということを意味している（問題IV-6参照）．このとき $ka=\epsilon$ とおくと（3）を（1）に代入して

$$\tan\delta_l \approx \frac{\epsilon^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}\frac{(2l+1)j_l(\alpha_0'a)-\alpha_0'aj_{l-1}(\alpha_0'a)}{\alpha_0'aj_{l-1}(\alpha_0'a)}$$

となる．$\xi\ll 1$ であるから

$$\alpha_0'a\approx\eta\left(1+\frac{i}{2}\xi\right),\quad \eta=\left[\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}a$$

として（15.10）［〃］の公式を用いることにより

$$\tan\delta_l \approx \frac{\epsilon^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}\cdot\left[\frac{(2l+1)(j_l(\eta)+(i/2)\xi\eta j_l'(\eta))}{\eta j_{l-1}(\eta)+(i/2)\xi\eta(\eta j_{l-1}'(\eta)+j_{l-1}(\eta))}-1\right]$$

$$\approx \frac{\epsilon^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}\left[\frac{(2l+1)j_l(\eta)}{\eta j_{l-1}(\eta)}-1\right.$$

$$\left.+\frac{i}{2}\xi\cdot(2l+1)\cdot\eta^2\frac{j_l^2(\eta)-j_{l-1}(\eta)j_{l+1}(\eta)}{(\eta j_{l-1}(\eta))^2}\right] \qquad (4)$$

を得る．S 波（$l=0$）に対しては

$$j_{-1}(\eta)=\frac{\cos\eta}{\eta},\quad (-1)!!=1$$

に注意して（15.6）［〃］を用いると

$$\tan\delta_0\approx\epsilon\times\left[\frac{\tan\eta}{\eta}-1+\frac{i}{2}\xi\times\frac{1-\sin\eta\cos\eta/\eta}{\cos^2\eta}\right].$$

弾性散乱断面積への寄与の主要項は，S 波の位相のずれの実数部分からきて（20.5）より

$$\sigma_{\mathrm{el}}\approx 4\pi a^2\cdot\left(\frac{\tan\eta}{\eta}-1\right)^2. \qquad (5)$$

吸収断面積への寄与の主要項は，S 波の位相のずれの虚数部分からきて（20.8）より

$$\sigma_{\mathrm{abs}}\approx 2\pi\frac{a}{k}\xi\frac{1-\sin\eta\cos\eta/\eta}{\cos^2\eta}. \qquad (6)$$

〔**注意**〕 公式（15.10）［〃］

$$\int j_l^2(\rho)\rho^2d\rho=\frac{1}{2}\rho^3[j_l^2(\rho)-j_{l-1}(\rho)j_{l+1}(\rho)]\geq 0,\quad l>0$$

より，$\tan\delta_l$ 虚数部分の ξ についての主要項は ξ が正のとき正であることがわかる．

問題V-12　［第3版］

任意のポテンシャルに対して次の不等式が成立することを証明せよ．

$$\sigma_{\mathrm{el}}(0) \geq \left(\frac{k\sigma_{\mathrm{tot}}}{4\pi}\right)^2$$

ただし，左辺の量は前方における弾性散乱の微分断面積である．

〔解〕（20.4）より

$$\sigma_{\mathrm{el}}(0) = \left|\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)\right|^2$$
$$= \frac{1}{4k^2}\sum_{l,l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)(S_l-1)(S_{l'}{}^*-1).$$

一方（20.9）より

$$\left(\frac{k\sigma_{\mathrm{tot}}}{4\pi}\right)^2 = \left[\frac{1}{4k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-\mathrm{Re}(S_l))\right]^2$$
$$= \frac{1}{4k^2}\sum_{l,l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)(1-\mathrm{Re}(S_l))(1-\mathrm{Re}(S_{l'})).$$

$S_l = \alpha + i\beta$,　$S_{l'} = \alpha' + i\beta'$ とおくと

$$\frac{1}{2}[(S_l-1)(S_{l'}{}^*-1)+(S_l{}^*-1)(S_{l'}-1)] = (\alpha-1)(\alpha'-1)+\beta\beta',$$
$$(1-\mathrm{Re}(S_l))(1-\mathrm{Re}(S_{l'})) = (1-\alpha)(1-\alpha').$$

したがって

$$\sigma_{\mathrm{el}}(0) - \left(\frac{k\sigma_{\mathrm{tot}}}{4\pi}\right)^2 = \frac{1}{4k^2}\sum_{l,l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)\mathrm{Im}S_l\cdot\mathrm{Im}S_{l'}$$
$$= \frac{1}{4k^2}\left[\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{Im}S_l\right]^2 \geq 0.$$

〔別解〕（20.23）より

$$\left(\frac{k\sigma_{\mathrm{tot}}}{4\pi}\right)^2 = (\mathrm{Im}f(0))^2 \leq (\mathrm{Re}f(0))^2 + (\mathrm{Im}f(0))^2 = |f(0)|^2 = \sigma_{\mathrm{el}}(0).$$

問題V-13　［第2版，V-問10と同一］

200,000電子ボルトのエネルギーの陽子がアルミニウムによって散乱される場合，まっすぐ後方に跳ね返えされてくる強度（$\theta=180°$）は Rutherford の公式を用いて計算したものの96%であることが知られている．この結果

が，$l=0$ の波に対する位相のずれへの影響だけを考えればよい程度に十分短距離でのクーロン・ポテンシャルからのずれによるものと仮定した場合，このポテンシャルの変形された部分は引力か，斥力か？　この変形ポテンシャルによって生じた $l=0$ の波の位相のずれにおける変化の符号と大きさを求めよ．

〔解〕(21.27) [20.24] の右辺で修正項は $l=0$ しか効かないとすると

$$f_m(\theta)=f_c(\theta)+\frac{1}{k}e^{i(2\eta_0+\delta_0)}\sin\delta_0.$$

したがって

$$|f_m(\pi)|^2=|f_c(\pi)|^2+\frac{\sin^2\delta_0}{k^2}+2\mathrm{Re}\left(f_c(\pi)\cdot\frac{1}{k}e^{-i(2\eta_0+\delta_0)}\sin\delta_0\right).$$

(21.10) [20.10] より

$$f_c(\pi)=-\frac{n}{2k}e^{2i\eta_0}$$

であるから

$$|f_m(\pi)|^2=\frac{n^2}{4k^2}+\frac{\sin^2\delta_0}{k^2}-\frac{n}{k^2}\cos\delta_0\sin\delta_0 \tag{1}$$

となる．題意より

$$|f_m(\pi)|^2=0.96\times|f_c(\pi)|^2$$

であるから，これを（1）へ代入して

$$\sin^2\delta_0-n\cos\delta_0\sin\delta_0+0.01n^2=0.$$

これを解いて

$$\tan\delta_0=n\times\frac{1\pm\sqrt{0.96-0.0004n^2}}{2(1+0.01n^2)} \tag{2}$$

を得る．

$$m_pc^2=938.26\,\mathrm{Mev},\quad m_{Al}c^2=25132.67\,\mathrm{Mev}$$

より換算質量 μ は

$$\mu c^2=\frac{m_pc^2\times m_{Al}c^2}{m_pc^2+m_{Al}c^2}=904.49\,\mathrm{Mev}.$$

$$k\hbar c=\mu c^2\times\sqrt{\frac{2\times0.2}{m_pc^2}}=18.68\,\mathrm{Mev}$$

であるから

$$n=\frac{\mu c^2}{k\hbar c}\times ZZ'\times\frac{e^2}{\hbar c}$$

と変形して上の値および $ZZ'=13$, $e^2/\hbar c=1/137$ を代入すると

$$n=4.59,\quad n^2=21.11.$$

これを（2）式に入れて

$$\tan\delta_0=3.75\quad \text{または}\quad 0.047.$$

$\pi/2>\delta_0>-\pi/2$ の解を求めると

$$\delta_0=1.31\quad \text{または}\quad 0.047$$

となりいずれも正である．したがってこの補正は引力であることがわかる．

第 VI 章

量子力学の行列形式

問題 VI－1　［第2版，VI-問1と同一］

任意のエルミット行列は，一つのユニタリー行列によって対角化されるものと仮定し，これから二個のエルミット行列が同一のユニタリー変換によって対角化されうるための必要十分条件は，それらが可換であることを示せ．

〔解〕（**必要なこと**）

二つのエルミット行列A, Bがあるユニタリー行列 U で同時に対角化されたとする：

$$U^\dagger AU=D_a,\quad U^\dagger BU=D_b,\quad (D_a, D_b：\text{対角行列}).$$

$D_aD_b=D_bD_a$ であるから

$$U^\dagger AUU^\dagger BU=U^\dagger ABU=U^\dagger BUU^\dagger AU=U^\dagger BAU.$$

これより

$$AB=BA$$

を得る．

（**十分なこと**）

n 次の二つのエルミット行列 A, B が交換可能とする：

$$AB=BA. \tag{1}$$

まず A に適当なユニタリー変換 U を施して対角化する：

$$U^\dagger AU=\begin{bmatrix} a_1E^{(1)} & & & \\ & a_2E^{(2)} & & \bigcirc \\ & & \ddots & \\ \bigcirc & & & a_sE^{(s)} \end{bmatrix}\equiv A'. \tag{2}$$

ここに $i\neq j$ なら $a_i\neq a_j$ であり，$E^{(i)}$ は n_i 次単位行列である（$\sum_{i=1}^{s}n_i=n$）．A' の固有値 a_i の固有空間を R_i とし，$U^\dagger BU=B'$ とおくと（1）より $A'B'=B'A'$ であるから，R_i に属する任意のベクトル $\boldsymbol{x}$ に対し

$$A'B'\boldsymbol{x}=B'A'\boldsymbol{x}=a_iB'\boldsymbol{x}$$

となって $B'\boldsymbol{x}\in R_i$, つまり

$$B'R_i\subset R_i.$$

これと，B' がエルミット行列であることより

$$B'=\begin{bmatrix} B^{(1)} & & & \bigcirc \\ & B^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ \bigcirc & & & B^{(s)} \end{bmatrix}$$

が結論される．ここに $B^{(i)}$ は n_i 次エルミット行列である．$B^{(i)}$ をユニタリー行列 $V^{(i)}$ で対角化する：

$$V^{(i)\dagger}B^{(i)}V^{(i)}=D^{(i)}\quad (D^{(i)}\text{ は対角行列})\quad i=1,\cdots\cdots,s.$$

そして

$$V=\begin{bmatrix} V^{(1)} & & & \bigcirc \\ & V^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ \bigcirc & & & V^{(s)} \end{bmatrix}$$

とおくと

$$(UV)^\dagger AUV=V^\dagger A'V=\begin{bmatrix} a_1V^{(1)\dagger}E^{(1)}V^{(1)} & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & a_sV^{(s)\dagger}E^{(s)}V^{(s)} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_1E^{(1)} & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & a_sE^{(s)} \end{bmatrix},$$

$$(UV)^\dagger BUV=V^\dagger B'V=\begin{bmatrix} V^{(1)\dagger}B^{(1)}V^{(1)} & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & V^{(s)\dagger}B^{(s)}V^{(s)} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} D^{(1)} & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & D^{(s)} \end{bmatrix}$$

となり，A,B は一つのユニタリー行列 UV で同時に対角化される．

問題Ⅵ-2 〔第2版，Ⅵ-問2と類似〕

有限次数の正則行列は正方行列でなければならないことを証明せよ．なおこの場合方程式 $AA^{-1}=\mathbf{1}$ は方程式 $A^{-1}A=\mathbf{1}$ を含んでいることを示せ．

〔解〕 A を m 行 n 列の行列とし $m>n$ とする．ある行列 B が存在して

$$AB=\mathbf{1} \tag{1}$$

を満たすとすると，B は n 行 m 列でなければならない．A の第 i 行目を n 次元ベクトルとみなして ${}^t\boldsymbol{a}_i$（$i=1,\cdots,m$）と書き，B の第 j 列目を n 次元ベクトルと見なして $\boldsymbol{b}_j$（$j=1,\cdots,m$）と書くと（1）は

$$\begin{pmatrix} {}^t\boldsymbol{a}_1 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{a}_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{b}_1 \cdots\cdots \boldsymbol{b}_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{b}_1) & \cdots\cdots & (\boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{b}_m) \\ \vdots & & \vdots \\ (\boldsymbol{a}_m\cdot\boldsymbol{b}_1) & \cdots\cdots & (\boldsymbol{a}_m\cdot\boldsymbol{b}_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & 1 \end{pmatrix}$$

となる．仮定により $m>n$ であるから ${}^t\boldsymbol{a}_i$（$i=1,\cdots,m$）は一次従属であり，少なくとも一つの一次関係

$$\sum_{i=1}^{m} c_i {}^t\boldsymbol{a}_i = 0 \quad \text{（すべての } c_i \text{ は零ではない）}$$

が存在する．ところが $(\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_j)=\delta_{ij}$ より

$$0=\left(\sum_{i=1}^{m} c_i\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_j\right)=c_j \quad j=1,\cdots,m$$

となり，c_j が一斉に零とはならないという仮定に矛盾する．したがって（1）を満たす B は存在しない．$m<n$ の場合は A と B との役割を入れかえればよいから，結局非特異な行列は正方行列でなければならない．

次に A を m 行 m 列の行列とし，（1）を満たす B が存在するなら

$$BA=\mathbf{1} \tag{2}$$

をも満たすことを証明する．もし

$$CA=\mathbf{1} \tag{3}$$

を満たす C が存在すれば

$$C=C\mathbf{1}=C(AB)=(CA)B=\mathbf{1}B=B$$

となるから，証明すべきことは（1）を満たす B が存在するような A に対して（3）を満たす C が存在するということである．

第一段：（1）を満たす B が存在するための A に対する必要十分条件は ${}^t\boldsymbol{a}_i$（$i=1,\cdots,m$）が一次独立であることである．

（証明）

・必要なこと

${}^t\boldsymbol{a}_i$ が一次従属なら前の議論が使えて B は存在しない．

・十分なこと

${}^t\boldsymbol{a}_i$ が一次独立であるとしこれに Schmidt の直交化（問題III-1参照）

$$\begin{cases} {}^t\boldsymbol{a}_1 = A_1{}^1\boldsymbol{e}_1 \\ {}^t\boldsymbol{a}_2 = A_2{}^1\boldsymbol{e}_1 + A_2{}^2\boldsymbol{e}_2 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{a}_m = A_m{}^1\boldsymbol{e}_1 + A_m{}^2\boldsymbol{e}_2 + \cdots\cdots + A_m{}^m\boldsymbol{e}_m \end{cases} \qquad (\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij} \qquad (4)$$

を行なう．${}^t\boldsymbol{a}_i$ の一次独立性より $A_i{}^i \neq 0$ $(i=1,,\cdots m)$．このとき $(\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_1)=\delta_{i1}$ を満たす $\boldsymbol{b}_1$ は

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{1}{A_1{}^1}\boldsymbol{e}_1 - \frac{1}{A_2{}^2}\times\frac{A_2{}^1}{A_1{}^1}\boldsymbol{e}_2 - \frac{1}{A_3{}^3}\left(\frac{A_3{}^1}{A_1{}^1} - \frac{A_2{}^1}{A_1{}^1}\frac{A_3{}^2}{A_2{}^2}\right)\boldsymbol{e}_3 - \cdots\cdots$$

と一意的に求まる．$(\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_j)=\delta_{ij}$ $(i, j=1, \cdots, m)$ を満たす $\boldsymbol{b}_j$ $(j=1, \cdots, m)$ も同様な手続きにより一意的に求まるから（1）を満たすBは存在して一意的である．

第二段： ${}^t\boldsymbol{a}_i$ $(i=1, \cdots, m)$ が一次独立なことと $\boldsymbol{a}_i$ $(i=1, \cdots, m)$（$\boldsymbol{a}_i$ は Aの第 i 列）が一次独立なことは同等である．

（証明） $\boldsymbol{e}_i$ を基底ベクトルとする表示では A は（4）より

$$A \to \begin{bmatrix} A_1{}^1 & & & 0 \\ A_2{}^1 & A_2{}^2 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ A_m{}^1 & A_m{}^2 & & A_m{}^m \end{bmatrix}$$

とあらわされ，$\boldsymbol{a}_i$ が一次独立であるから $A_i{}^i \neq 0$．したがってこの表示で

$$\boldsymbol{a}_j \to \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ A_j{}^j \\ \vdots \\ A_m{}^j \end{pmatrix} \qquad j=1, \cdots\cdots, m$$

も一次独立である．（一次独立性は表示の仕方によらない．）逆も同様にして証明される（縦と横とをひっくり返せばよい．）

第三段： $\boldsymbol{a}_i$ $(i=1, \cdots, m)$ が一次独立なら（3）を満たす C が存在する．

（証明） （3）は具体的に書けば

$$\begin{pmatrix} {}^t\boldsymbol{c}_1 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{c}_m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 \cdots\cdots \boldsymbol{a}_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\boldsymbol{c}_1\cdot\boldsymbol{a}_1)\cdots\cdots(\boldsymbol{c}_1\cdot\boldsymbol{a}_m) \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \\ (\boldsymbol{c}_m\cdot\boldsymbol{a}_1)\cdots\cdots(\boldsymbol{c}_m\cdot\boldsymbol{a}_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & 1 \end{pmatrix}$$

となり，第一段の議論をそのまま用いればよい．

ここまでで証明されたことは（1）から（2）が出ることであるが，（2）から（1）が出ることも全く同様に証明される．

〔**注意**〕上の証明より，A が正則であることと $\det(A)$（$=A_1{}^1\cdots A_n{}^n$）$\neq 0$ とは同値であることがわかる．証明がこみ入ったのは行列式という概念を用いずに，正則性を論じたからである．A が正則であることと $\det A\neq 0$ との同値性があらかじめわかっていれば証明は大変簡単になる．

問題Ⅵ-3　［第3版］

$\det(e^A)=e^{\mathrm{tr}(A)}$ を証明せよ．なおこの証明において仮定されなければならなかった A についての条件を述べよ．

〔**解**〕A を任意の n 次正方行列とする．等式

$$\frac{d}{dt}e^{tA}=Ae^{tA}$$

を成分別に書けば，$(A)_{ij}=a_{ij}$，$(e^{tA})_{ij}=e_{ij}(t)$ とおいて

$$\frac{d}{dt}e_{ij}(t)=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}\cdot e_{kj}(t). \qquad (1)$$

一方行列式の定義より

$$\det(e^{tA})=\sum_{\sigma\in S_n}\epsilon(\sigma)e_{1\sigma(1)}(t)\cdots\cdots e_{n\sigma(n)}(t).$$

ここに和は $(1,\cdots,n)$ のすべての置換 $S_n\ni\sigma:(1,\cdots,n)\to(\sigma(1),\cdots,\sigma(n))$ にわたり $\epsilon(\sigma)$ は σ が偶置換が奇置換にしたがって $+1$ か -1 をとる．この両辺を t で微分して（1）を用いると

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\det(e^{tA})&=\sum_{l=1}^{n}\sum_{\sigma\in S_n}\epsilon(\sigma)e_{1\sigma(1)}(t)\cdots e'_{l\sigma(l)}(t)\cdots e_{n\sigma(n)}(t)\\&=\sum_{l=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}a_{lk}\{\sum_{\sigma\in S_n}\epsilon(\sigma)e_{1\sigma(1)}(t)\cdots e_{k\sigma(l)}(t)\cdots e_{n\sigma(n)}(t)\}.\end{aligned}$$

{　} は行列

$$\begin{bmatrix} e_{11}(t) & \cdots\cdots e_{k1}(t) & \cdots\cdots e_{n1}(t)\\ \vdots & \vdots & \vdots\\ e_{1n}(t) & \cdots\cdots e_{kn}(t) & \cdots\cdots e_{nn}(t)\end{bmatrix}$$
（l 列）

の行列式であるから，$k\neq l$ のとき零で $k=l$ のとき $\det(e^{tA})$ となる．したがって

$$\frac{d}{dt}\det(e^{tA})=\sum_{l=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}a_{lk}\delta_{lk}\det(e^{tA})=\mathrm{tr}(A)\cdot\det(e^{tA})$$

を得る．$\det(e^{tA})|_{t=0}=1$ を用いてこの微分方程式を解くと

$$\det(e^{tA})=e^{t\times\mathrm{tr}(A)}.$$

ここで $t=1$ とおけばよい．

(別解)

任意の n 次正方行列 A に対し，適当な n 次正則行列 P をとれば

$$P^{-1}AP=\begin{pmatrix} A^{(1)} & & & 0 \\ & A^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & A^{(s)} \end{pmatrix},\quad A^{(i)}=\begin{pmatrix} \alpha_i & 1 & & 0 \\ & \alpha_i & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ 0 & & & \alpha_i \end{pmatrix}$$

となる．ただし $A^{(i)}$ は n_i 次正方行列 $(\sum_{i=1}^{s}n_i=n)$ である．(Jordanの標準形)

$$(P^{-1}AP)^m=P^{-1}A^mP=\begin{pmatrix} A^{(1)m} & & & 0 \\ & A^{(2)m} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & A^{(s)m} \end{pmatrix},\quad A^{(i)m}=\begin{pmatrix} \alpha_i{}^m & & * \\ & \ddots & \\ 0 & & \alpha_i{}^m \end{pmatrix}$$

であるから

$$e^{P^{-1}AP}=P^{-1}e^AP=\begin{pmatrix} e^{A^{(1)}} & & & 0 \\ & e^{A^{(2)}} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{A^{(s)}} \end{pmatrix},\quad e^{A^{(i)}}=\begin{pmatrix} e^{\alpha_i} & & * \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{\alpha_i} \end{pmatrix}$$

したがって

$$\det(e^{P^{-1}AP})=\det(P^{-1}e^AP)=\det e^A=\prod_{i=1}^{s}\det e^{A^{(i)}}=\exp[\sum_{i=1}^{s}n_i\alpha_i]$$

$$=\exp[\sum_{i=1}^{s}\mathrm{tr}(A^{(i)})]=\exp[\mathrm{tr}(P^{-1}AP)]=\exp[\mathrm{tr}(A)].$$

〔**注意**〕 e^{tA} の各成分は t についての整関数（無限遠点以外では正則な関数）になっている．なぜなら，

$$\max_{i,j}|a_{ij}|=M$$

とおけば，任意の i,j に対し

$$|(A^m)_{i,j}|\leq n^{m-1}M^m$$

が成り立つから

$$e_{ij}(t)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(A^m)_{i,j}}{m!}t^m$$

の収束半径は無限大であることがわかる.

問題 VI-4　［第2版, VI-問3と同一］

次の方程式を満たす二個の行列 A および B を求めよ.

$$A^2=\bigcirc,\quad AA^\dagger+A^\dagger A=\mathbf{1},\quad B=A^\dagger A.$$

ただし$\bigcirc$は零行列で, $\mathbf{1}$は単位行列である. $B^2=B$ が成り立つことを示し, B に縮退がないと仮定して, B が対角型になっている表示での A および B の具体的な形を求めよ. また, 何らかの表示でこの A を対角化することができるか?

〔解〕

$$B^2=A^\dagger AA^\dagger A=A^\dagger(\mathbf{1}-A^\dagger A)A=A^\dagger A-(A^\dagger)^2A^2=A^\dagger A=B$$

より $B^2=B$ が証明された.

$B^\dagger=B$ であるから B は適当なユニタリー変換で対角化できる. その固有値 λ は $B^2=B$ より $\lambda^2=\lambda$, つまり $\lambda=1$ または0であり B が縮退していないとすると

$$B=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}$$

とおいてよい. このとき A の形を求める.

$$A=\begin{bmatrix}a&b\\c&d\end{bmatrix}$$

とおくと

$$A^\dagger A=\begin{bmatrix}a^*&c^*\\b^*&d^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a&b\\c&d\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}|a|^2+|c|^2&a^*b+c^*d\\b^*a+d^*c&|b|^2+|d|^2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}$$

より

$$b=d=0,\quad |a|^2+|c|^2=1.$$

$$A^2=\begin{bmatrix}a&0\\c&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a&0\\c&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a^2&0\\ca&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0&0\\0&0\end{bmatrix}$$

より

$$a=0 \quad \text{したがって} \quad |c|=1.$$

これより

$$A=\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ e^{i\theta} & 0 \end{bmatrix} \quad \theta \text{実数}$$

が得られ，これは $AA^{\dagger}+A^{\dagger}A=\mathbf{1}$ を満たしている．

Aが適当な表示で対角化できたとすると，その固有値は $A^2=0$ よりすべて0になる．つまりAが零行列になってしまいこれは $AA^{\dagger}+A^{\dagger}A=\mathbf{1}$ と矛盾する．したがってAは対角化できない．

問題VI-5　［第2版，VI-問4と同一］

次の方程式を満たす三個の行列 A, B および C を求めよ．

$$A^2=B^2=C^2=\mathbf{1},\quad AB+BA=BC+CB=CA+AC=\mathbf{O}$$

ただし，$\mathbf{1}$は単位行列，$\mathbf{O}$は零行列である．Aに縮退がないと仮定してAが対角型になっている表示での，これらすべての行列に対する具体的な形を求めよ．

〔**解**〕 Aが対角行列ならその対角要素は $A^2=1$ より $+1$ または -1 である．Aが縮退していないとすると

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

としてよい．このとき

$$B=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix},\qquad C=\begin{bmatrix} e & f \\ g & h \end{bmatrix}$$

とおくと

$$AB+BA=\begin{bmatrix} 2a & 0 \\ 0 & -2d \end{bmatrix}=\mathbf{O} \text{ より} \qquad a=d=0,$$

$$AC+CA=\mathbf{O} \text{ より} \qquad e=h=0,$$

$$B^2=\begin{bmatrix} bc & 0 \\ 0 & bc \end{bmatrix}=\mathbf{1} \text{ より} \qquad bc=1,$$

$$C^2=\mathbf{1} \text{ より} \qquad fg=1,$$

$$BC+CB=\begin{bmatrix} bg+cf & 0 \\ 0 & bg+cf \end{bmatrix}=\bigcirc \quad \text{より} \qquad bg+cf=0.$$

これより $bg=\pm i,\ cf=\mp i$（複符号同順）が得られ

$$B=\begin{bmatrix} 0 & b \\ 1/b & 0 \end{bmatrix},\quad C=\pm\begin{bmatrix} 0 & ib \\ -i/b & 0 \end{bmatrix},\quad b:\text{零でない複素数}$$

となる．

問題Ⅵ-6　［第2版，Ⅵ-問5と同一］

次の方程式を満たす三個の行列 A, B および C の具体的な形を求めよ．

$$A^2=B^2=C^2=\mathbf{1},\quad BC-CB=iA$$

ただし，$\mathbf{1}$は単位行列．$AB+BA=AC+CA=\bigcirc$ であることを示せ．ただし○は零行列．Aに縮退がないと仮定し，Aが対角型になっている表示での三個の行列のすべての具体的な形を求めよ．

〔解〕

$$iAB+iBA=(BC-CB)B+B(BC-CB)=BCB-CB^2+B^2C-BCB$$
$$=-C+C=\bigcirc.$$

同様に $AC+CA=\bigcirc$ も得られる．A が縮退していない対角行列とすると前問と同じ理由で

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

このとき

$$B=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix},\quad C=\begin{bmatrix} e & f \\ g & h \end{bmatrix}$$

とおくと

$$BC-CB=\begin{bmatrix} bg-cf & (a-d)f-b(e-h) \\ -(a-d)g+c(e-h) & cf-bg \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}$$

より

$$bg-cf=i,\quad a=d,\quad e=h$$

を得る．

$$B^2=\begin{bmatrix} a & b \\ c & a \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & b \\ c & a \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a^2+bc & 2ab \\ 2ac & bc+a^2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

より

$$a=0,\ \ bc=1.$$

同様にして

$$e=0,\ \ fg=1.$$

以上を解くと

$$bg=\frac{i\pm\sqrt{3}}{2}\ \left(cf=\frac{-i\pm\sqrt{3}}{2}\right)$$

となり，答えは求まるがあまりきれいではない．この A, B, C は次節で出てくるスピン行列をモデルにしたものと考えれば

$$BC-CB=2iA$$

とする方がもっともで，このときは $bg-cf=2i$ となるから $bg=i,\ cf=-i$ と答えがきれいに求まって

$$B=\begin{bmatrix} 0 & b \\ 1/b & 0 \end{bmatrix},\quad C=\begin{bmatrix} 0 & -ib \\ i/b & 0 \end{bmatrix},\quad b\ \text{零でない複素数}$$

となる．

問題VI-7　［第3版］

A および B は次数の等しい任意の正方行列で，かつ $C\equiv[B, A]$ とする．もしも $[C, A]=[C, B]=0$ であるとすれば

$$e^{A+B}=e^Ae^Be^{\frac{1}{2}C}$$

であることを証明せよ．

〔解〕

$$F(t)=e^{-tB}e^{-tA}e^{t(A+B)}$$

とおくと

$$\frac{d}{dt}F(t)=e^{-tB}(-B)e^{-tA}e^{t(A+B)}+e^{-tB}e^{-tA}(-A)e^{t(A+B)}$$
$$+e^{-tB}e^{-tA}(A+B)e^{t(A+B)}=e^{-tB}[e^{-tA}, B]e^{t(A+B)}. \tag{1}$$

$$[e^{-tA}, B]=D(t)$$

とおくと

$$e^{-tA}Be^{tA}-B=D(t)e^{tA}. \tag{2}$$

ここで $G(t)$ を

$$G(t)=e^{-tA}Be^{tA}$$

で定義すると，問題IV-3の〔注意〕より，この各要素も t の整関数となるから t の巾で展開できる．

$$\frac{d}{dt}G(t)=e^{-tA}(-A)Be^{tA}+e^{-tA}BAe^{tA}=e^{-tA}[B,A]e^{tA}$$

より

$$G'(0)=[B,A].$$

同様にして

$$G''(0)=[[B,A],A],\quad G'''(0)=[[[B,A],A],A],\cdots\cdots$$

を得るから

$$e^{-tA}Be^{tA}=B+[B,A]t+\frac{1}{2!}[[B,A],A]t^2+\frac{1}{3!}[[[B,A],A],A]t^3+\cdots\cdots \tag{3}$$

となる．題意より $C\equiv[B,A]$ は $[C,A]=0$ を満たすから t^2 の項から先はすべて0となり（2）より

$$Ct=D(t)e^{tA}\quad つまり\quad D(t)=Cte^{-tA}$$

が得られる．これを（1）に代入すると，$[C,B]=0$ に注意して，

$$\frac{d}{dt}F(t)=e^{-tB}Cte^{-tA}e^{t(A+B)}=Cte^{-tB}e^{-tA}e^{t(A+B)}=CtF(t)$$

となる．$F(0)=1$ よりこの微分方程式の解は

$$F(t)=e^{\frac{1}{2}t^2C}.$$

つまり

$$e^{-tB}e^{-tA}e^{t(A+B)}=e^{\frac{1}{2}t^2C}$$

となりここで $t=1$ とおけばよい．

問題VI-8　［第2版，VI-問9と類似］

単一粒子の一次元運動に対するハミルトニアンを $H=p^2/2\mu+V(x)$ とし，さらに $V(x)$ は x についての羃級数として表わしうるものとすれば，

$$\frac{dx}{dt}=\frac{p}{\mu}\qquad \frac{dp}{dt}=-\frac{dV}{dx}$$

となることを純粋の行列算法によって証明せよ．ただし x および p は Heisenberg 流の見方での力学変数である．

〔解〕 (24.10) [23.2] より

$$\frac{dx}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[x,H]=\frac{1}{i\hbar}\left[x,\ \frac{p^2}{2\mu}\right]=\frac{p}{\mu}.$$

また (24.33) [23.18] を用いると

$$\frac{dp}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[p,H]=\frac{1}{i\hbar}[p,V(x)]=-\frac{dV}{dx}.$$

問題VI-9　［第2版，VI-問11と類似］

$A(x,p)$ および $B(x,p)$ は x および p についての冪級数として表わすことができ，かつ $[x,p]=i\hbar$ とする．このとき純粋に行列算法によって次の関係を証明せよ．

$$\lim_{\hbar\to0}\frac{1}{i\hbar}[A,B]=\{A,B\}$$

ただし右辺は x および p が古典論の変数と見なして計算された Poisson 括弧である．

〔解〕 まず数学的帰納法により

$$\lim_{\hbar\to0}\frac{1}{i\hbar}[x^n,p^m]=nx^{n-1}mp^{m-1},\quad n,m：負でない整数 \tag{1}$$

を証明する．$m=0$ は自明で，$m=1$ は (24.32) [23.17] より出る．

$$[x^n,p^m]=[x^n,p^{m-1}]p+p^{m-1}[x^n,p]$$

より，(1) がすべての n と，$m-1$ までの整数に対して成り立つとすると

$$\lim_{\hbar\to0}\frac{1}{i\hbar}[x^n,p^m]=\lim_{\hbar\to0}\frac{1}{i\hbar}[x^n,p^{m-1}]\,p+p^{m-1}\lim_{\hbar\to0}\frac{1}{i\hbar}[x^n,p]$$
$$=nx^{n-1}(m-1)p^{m-1}+p^{m-1}nx^{n-1}=nx^{n-1}mp^{m-1}$$

となり (1) は証明された．($\hbar\to0$ の極限をとってしまった後では x と p とは可換である．) (1) を用いて，k,l,m,n を負でない整数とするとき

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[x^k p^l, x^m p^n] = \lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}(x^k p^l x^m p^n - x^k x^m p^l p^n + x^m x^k p^n p^l - x^m p^n x^k p^l)$$

$$= x^m \lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[x^k, p^n]\ p^l + x^k \lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[p^l, x^m]p^n$$

$$= kx^{k-1}p^l x^m n p^{n-1} - mx^{m-1}p^n x^k l p^{l-1} \qquad (2)$$

が得られる．仮定により

$$A(x, p) = \sum_{k,l=0}^{\infty} a_{k,l}x^k p^l,\quad B(x, p) = \sum_{m,n=0}^{\infty} b_{m,n}x^m p^n$$

と書けるから

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[A(x, p), B(x, p)] = \sum_{k,l,m,n} a_{k,l}b_{m,n}\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[x^k p^l, x^m p^n]$$

$$= \sum_{k,l} ka_{k,l}x^{k-1}p^l \sum_{m,n} nb_{m,n}x^m p^{n-1} - \sum_{m,n} mb_{m,n}x^{m-1}p^n \sum_{k,l} la_{k,l}x^k p^{l-1}$$

$$= \frac{\partial A(x, p)}{\partial x}\frac{\partial B(x, p)}{\partial p} - \frac{\partial B(x, p)}{\partial x}\cdot\frac{\partial A(x, p)}{\partial p} = \{A, B\}$$

となる．

問題VI-10　［第2版，VI-問8と類似］

ハミルトニアン $H = \mathbf{p}^2/2\mu + V(\mathbf{r})$ は，固有値 E_k をもつ固有ケット $|k\rangle$ の一組をもっているとする．もしも $|l\rangle$ が離散的な固有値をもつ任意のケットであるとすれば，次の方程式が成立することを証明せよ．

$$\mathrm{S}_k(E_k - E_l)\,|\langle k|x|l\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}$$

ただし，x は $\mathbf{r}$ の一つの直交成分である．この証明の副産物として第III章問題9を行列を用いて証明せよ．

〔**解**〕

$$[x, H] = \frac{1}{2\mu}[x, \mathbf{p}^2] = \frac{1}{2\mu}(2i\hbar)p_x, \qquad (1)$$

$$[x, [x, H]] = \frac{i\hbar}{\mu}[x, p_x] = -\frac{\hbar^2}{\mu}$$

であるから，この両辺を $\langle l|$ と $|l\rangle$ ではさむと

$$\langle l|x^2H+Hx^2-2xHx|l\rangle=\left\langle l\right|-\frac{\hbar^2}{\mu}\left|l\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}.$$

この左辺は $H|k\rangle=E_k|k\rangle$, $\langle l|x|k\rangle=\langle k|x^\dagger|l\rangle^*=\langle k|x|l\rangle^*$ に注意すると

$$\langle l|x^2H|l\rangle=E_l\langle l|x^2|l\rangle=E_l\mathrm{S}_k\langle l|x|k\rangle\langle k|x|l\rangle=E_l\mathrm{S}_k|\langle k|x|l\rangle|^2,$$
$$\langle l|Hx^2|l\rangle=E_l\langle l|x^2|l\rangle=\qquad\qquad=E_l\mathrm{S}_k|\langle k|x|l\rangle|^2,$$
$$\langle l|xHx|l\rangle=\mathrm{S}_k\langle l|x|k\rangle\langle k|Hx|l\rangle=\mathrm{S}_k\langle l|x|k\rangle E_k\langle k|x|l\rangle=\mathrm{S}_kE_k|\langle k|x|l\rangle|^2$$

より

$$2\mathrm{S}_k(E_l-E_k)|\langle k|x|l\rangle|^2$$

に等しいことがわかる．したがって

$$\mathrm{S}_k(E_k-E_l)|\langle k|x|l\rangle|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}. \tag{2}$$

問題III-9の行列力学的証明：

（1）より

$$[x,H]x+x[x,H]=\frac{i\hbar}{\mu}(p_xx+xp_x) \tag{3}$$

となり，

$$[x,H]x+x[x,H]=-Hx^2+x^2H$$

であるから（3）の両辺を $\langle 1|$ と $|2\rangle$ ではさむと題意より $\langle 1|H=\langle 1|E$, $H|2\rangle=E|2\rangle$ に注意して

$$\frac{i\hbar}{\mu}\langle 1|p_xx+xp_x|2\rangle=\langle 1|x^2H-Hx^2|2\rangle=\langle 1|x^2|2\rangle E-E\langle 1|x^2|2\rangle=0. \tag{4}$$

問題VI-11 ［第2版，VI-問10と類似］

調和振動子に対するハミルトニアンは座標表示では次のように書くことができる．

$$\langle x|H|x'\rangle=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\delta(x-x')+\tfrac{1}{2}Kx^2\delta(x-x')$$

この H を運動量表示に変換して，(13.13)［〃］または (25.16) 式で与えられている x-表示の波動関数に対応する p-表示の波動関数を求めよ．

〔**解**〕 座標表示のハミルトニアン $\langle x|H|x'\rangle$ から運動量表示のハミルトニアン $\langle p$

$|H|p'\rangle$ を求めるには，両者の間に成り立つ変換式

$$\langle p|H|p'\rangle=\int dx\int dx'\langle p|x\rangle\langle x|H|x'\rangle\langle x'|p'\rangle \tag{1}$$

を用いる．$\langle x|p\rangle$ は運動量作用素 P の固有値 p をもつ固有ベクトルの座標表示であるから

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|p\rangle=p\langle x|p\rangle$$

を満たし，これを解いて

$$\langle x|p\rangle=C\exp[ixp/\hbar] \tag{2}$$

が得られる．これより $\langle p|x\rangle=C^*\exp[-ixp/\hbar]$ となり定数 C は

$$\delta(p-p')=\langle p|p'\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dx\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle=|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \exp[-ix(p-p')/\hbar]$$
$$=2\pi\hbar|C|^2\delta(p-p')$$

より

$$|C|=(2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} \tag{3}$$

となる．(2)，(3) を (1) に代入すると

$$\langle p|H|p'\rangle=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'e^{-ipx/\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\delta(x-x')+\frac{1}{2}Kx^2\delta(x-x')\right]e^{ip'x'/\hbar}$$
$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dx'\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}e^{-ipx/\hbar}\right)+e^{-ipx/\hbar}\frac{1}{2}Kx^2\right]\delta(x-x')e^{ip'x'/\hbar}$$
$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}Kx^2\right)e^{-i(p-p')x/\hbar}$$
$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{\hbar^2}{2}K\frac{d^2}{dp^2}\right)e^{-i(p-p')x/\hbar}$$
$$=\frac{p^2}{2m}\delta(p-p')-\frac{\hbar^2}{2}K\frac{d^2}{dp^2}\delta(p-p') \tag{4}$$

を得る．これは

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}Kx^2$$ に

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\to p,\quad x\to+i\hbar\frac{d}{dp}$$

なる変換をほどこしたものになっている．

次に x 表示において (25.16) で与えられる波動関数は p 表示では

$$\langle p|n\rangle=\int dx\langle p|x\rangle\langle x|n\rangle=C^*\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp[-ixp/\hbar]A_n\exp[m\omega_c x^2/2\hbar]\frac{d^n}{dx^n}\exp[-m\omega_c x^2/\hbar]$$

$$=C^*A_n\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[\frac{m\omega_c}{2\hbar}x^2-\frac{ip}{\hbar}x\right]\frac{d^n}{dx^n}\exp\left[-\frac{m\omega_c x^2}{\hbar}\right]$$

$$=C^*A_n\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[\frac{m\omega_c}{2\hbar}\left(x-\frac{ip}{m\omega_c}\right)^2+\frac{p^2}{2\hbar m\omega_c}\right]\frac{d^n}{dx^n}\exp\left[-\frac{m\omega_c x^2}{\hbar}\right]$$

$$=C^*A_n\exp\left[\frac{p^2}{2\hbar m\omega_c}\right]\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[\frac{m\omega_c}{2\hbar}x^2\right]\frac{d^n}{dx^n}\exp\left[-\frac{m\omega_c}{\hbar}\left(x+\frac{ip}{m\omega_c}\right)^2\right]$$

$$=C^*A_n\exp\left[\frac{p^2}{2\hbar m\omega_c}\right]\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[\frac{m\omega_c}{2\hbar}x^2\right]\left[\frac{d}{d(ip/m\omega_c)}\right]^n\times\exp\left[-\frac{m\omega_c}{\hbar}\left(x+\frac{ip}{m\omega_c}\right)^2\right]$$

$$=C^*A_n\exp\left[\frac{p^2}{2\hbar m\omega_c}\right]\left(\frac{m\omega_c}{i}\right)^n\left(\frac{d}{dp}\right)^n\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[\frac{m\omega_c}{2\hbar}x^2-\frac{m\omega_c}{\hbar}\left(x+\frac{ip}{m\omega_c}\right)^2\right].$$

この x 積分は，Cauchy の積分定理を用いると Gauss 積分となり

$$\left(\frac{m\omega_c}{2\hbar}\right)^{-\frac{1}{2}}\sqrt{\pi}\exp\left[-\frac{p^2}{\hbar m\omega_c}\right].$$

ここで $C=C^*=(2\pi\hbar)^{-1/2}$ ととると

$$\langle p|n\rangle=(-i)^n\left(\frac{1}{m\omega_c}\right)^{\frac{1}{2}}(m\omega_c)^nA_n\exp\left[\frac{p^2}{2\hbar m\omega_c}\right]\left(\frac{d}{dp}\right)^n\exp\left[-\frac{p^2}{\hbar m\omega_c}\right]$$

が得られる．(13.12) [〃]，(13.17) [〃] より

$$A_n=(-1)^n\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}\times\alpha^{-n},\quad \alpha^2=\frac{m\omega_c}{\hbar}$$

である．

一方 x-表示のハミルトニアンに変数変換 $x\to p$, $m\to K^{-1}$, $K\to m^{-1}$ を施せば p 表示のハミルトニアンに一致する．この変換で

$$m\omega_c=(mK)^{\frac{1}{2}}\longrightarrow(mK)^{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{m\omega_c}$$

となるから

$$A_n\longrightarrow A_n\times\left(\frac{1}{m\omega_c}\right)^{\frac{1}{2}}(m\omega_c)^n$$

と変換され

$$\langle x|n\rangle \longrightarrow \left(\frac{1}{m\omega_c}\right)^{\frac{1}{2}}(m\omega_c)^n A_n \exp\left[\frac{p^2}{2\hbar m\omega_c}\right]\left(\frac{d}{dp}\right)^n \exp\left[-\frac{p^2}{\hbar m\omega_c}\right]$$

となる．これと $\langle p|n\rangle$ とは位相因子 $(-i)^n$ を除いて等しい．

問題VI-12 ［第3版］

（25.12）および（25.13）から求められた x に対する行列は，（13.18）［〃］と一致していることを示し，さらに（25.16）の方程式は（13.12）［〃］および（13.13）［〃］と一致していることを証明せよ．

〔解〕（25.12）および（25.13）より

$$x=\left(\frac{\hbar}{2m\omega_c}\right)^{\frac{1}{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdots\cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \end{bmatrix}$$

となるから，0でない x の行列要素は $\alpha=(m\omega_c/\hbar)^{1/2}$ に注意すると

$$(x)_{n,n+1}=\left(\frac{\hbar}{2m\omega_c}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{n+1}=\frac{1}{\alpha}\left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}},\quad n=0,1,2,\cdots\cdots$$

$$(x)_{n,n-1}=\left(\frac{\hbar}{2m\omega_c}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{n}=\frac{1}{\alpha}\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}},\quad n=1,2,3,\cdots\cdots$$

となり，（13.18）［〃］に一致する．ただし x の行列は0行，0列からはじまるものとした．

また波動関数については $\xi=\alpha x=(m\omega_c/\hbar)^{1/2}x$ を（13.12）［〃］および（13.13）［〃］に代入すると

$$u_n(x)=N_n(-1)^n\left(\frac{\hbar}{m\omega_c}\right)^{n/2}\exp\left[\frac{m\omega_c}{2\hbar}x^2\right]\left(\frac{d}{dx}\right)^n\exp\left[-\frac{m\omega_c}{\hbar}x^2\right]$$

となるから（25.16）の $\langle x|n\rangle$ と一致する．規格化因子 A_n はこの式と（13.17）［〃］から求まる．

第 VII 章

量子力学における対称性

問題VII-1 ［第3版］

$U_r(\boldsymbol{\varrho})$ に対する（26.4）の形と，$\mathbf{r}$ および $\mathbf{p}$ の成分に対する交換関係を利用して，（26.6）が成り立つことを証明せよ．

〔解〕 問題VI-7の（3）式で

$$A=-i\boldsymbol{\varrho}\cdot\mathbf{p}/\hbar,\quad \boldsymbol{B}=\mathbf{r},\quad t=1$$

とおくと

$$[\boldsymbol{B},A]=\boldsymbol{\varrho},\quad [[\boldsymbol{B},A],A]=0,$$

であるから（26.4）より

$$U_r^{\dagger}(\boldsymbol{\varrho})\mathbf{r}U_r(\boldsymbol{\varrho})=\mathbf{r}+\boldsymbol{\varrho}$$

を得る．

〔注意〕

問題VI-7 の（3）式は A, B が n 次正方行列の時に導いた式で，今の場合 $\mathbf{p}$ や $\mathbf{r}$ は無限次の行列と考えられるから，この証明はあまり厳密ではない．しかし（26.3）を用いて証明を厳密にすることができる．

問題VII-2 ［第3版］

回転の下では任意の二つのベクトルのスカラー積が不変であることを利用し，それによって回転行列 R の行および列がそれぞれお互いに正規直交になっていることを証明せよ．なお，R の転置行列が R の逆行列に等しいこと，また R の行列式が ±1 に等しいことも証明せよ．

〔解〕 添字 x, y, z をそれぞれ1，2，3と記す．$\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$ を正規直交系とし

$$\mathbf{r}=x\boldsymbol{e}_1+y\boldsymbol{e}_2+z\boldsymbol{e}_3$$

$$\mathbf{r}_R\equiv R\mathbf{r}=x(\boldsymbol{e}_1)_R+y(\boldsymbol{e}_2)_R+z(\boldsymbol{e}_3)_R=x_R\boldsymbol{e}_1+y_R\boldsymbol{e}_2+z_R\boldsymbol{e}_3$$

とすると (27.2) より

$$(\boldsymbol{e}_i)_R \equiv R\boldsymbol{e}_i = \sum_{j=1}^{3} R_{ji}\boldsymbol{e}_j. \tag{1}$$

三次元ユークリッド空間の二つのベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ の内積を $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ と書くことにすると $(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij}$ であるから，(1) より

$$((\boldsymbol{e}_i)_R, \boldsymbol{e}_j) = R_{ji} \tag{2}$$

が出る．Rは内積を不変にするから $((\boldsymbol{e}_i)_R, (\boldsymbol{e}_j)_R) = (R\boldsymbol{e}_i, R\boldsymbol{e}_j) = (\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij}$ となり $(\boldsymbol{e}_1)_R, (\boldsymbol{e}_2)_R, (\boldsymbol{e}_3)_R$ も正規直交系をなすから $\boldsymbol{e}_j$ を $\{(\boldsymbol{e}_i)_R\}_{i=1}^{3}$ で展開できて

$$\boldsymbol{e}_j = \sum_{i=1}^{3} a_{ji}(\boldsymbol{e}_i)_R$$

とおくと (2) 式より $a_{ji} = ((\boldsymbol{e}_i)_R, \boldsymbol{e}_j) = R_{ji}$ が得られる．つまり

$$\boldsymbol{e}_j = \sum_{i=1}^{3} R_{ji}(\boldsymbol{e}_i)_R. \tag{3}$$

$((\boldsymbol{e}_i)_R, (\boldsymbol{e}_j)_R) = \delta_{ij}$ に (1) を代入すると

$$\delta_{ij} = (\sum_{k=1}^{3} R_{ki}\boldsymbol{e}_k, \sum_{l=1}^{3} R_{lj}\boldsymbol{e}_l) = \sum_{k,l} R_{ki}R_{lj}(\boldsymbol{e}_k, \boldsymbol{e}_l) = \sum_{k=1}^{3} R_{ki}R_{kj} \tag{4}$$

が得られ，Rの縦ベクトルは正規直交系をなす．また $(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij}$ に (3) を代入すると

$$\delta_{ij} = (\sum_{k=1}^{3} R_{ik}(\boldsymbol{e}_k)_R, \sum_{l=1}^{3} R_{jl}(\boldsymbol{e}_l)_R) = \sum_{k,l} R_{ik}R_{jl}((\boldsymbol{e}_k)_R, (\boldsymbol{e}_l)_R) = \sum_{k=1}^{3} R_{ik}R_{jk} \tag{5}$$

が得られ，R の横ベクトルも正規直交系をなすことがわかる．(4)，(5) より ${}^tRR = R{}^tR = 1$ が出るから $R^{-1} = {}^tR$．また $\det({}^tRR) = \det({}^tR) \times \det(R) = (\det R)^2 = 1$ より $\det R = \pm 1$.

〔**注意**〕 上の証明は3次元での回転行列に対して行なったが，n 次元回転に対して容易に拡張できる．

問題Ⅶ-3　[第3版]

(27.7) [24.1] の $\mathbf{L}$ の形と $\mathbf{r}$ および $\mathbf{p}$ の成分に対する交換関係を利用して，(27.14) [24.2] の三つの交換関係が成り立つことを証明せよ．

〔**解**〕 (27.7) [24.1] より

$$L_x=yp_z-zp_y,\quad L_y=zp_x-xp_z,\quad L_z=xp_y-yp_x.$$

これより

$$[L_x,L_y]=[yp_z-zp_y,zp_x-xp_z]=[yp_z,zp_x]-[xp_z,zp_y]$$
$$=y[p_z,z]p_x-x[p_z,z]p_y=i\hbar(xp_y-yp_x)=i\hbar L_z.$$

他の交換関係についても同様.

問題Ⅶ-4 〔第3版〕

(27.11) で定義されている三つの行列 $\mathbf{S}$ が $\mathbf{S}\times\mathbf{S}=i\hbar\,\mathbf{S}$ という関係を満たしていることを証明せよ. なお, $\mathbf{S}^2=2\hbar^2$ であることも証明せよ.

〔解〕 (27.11) より

$$S_xS_y=(i\hbar)^2\begin{bmatrix}0&0&0\\1&0&0\\0&0&0\end{bmatrix},\quad S_yS_x=(i\hbar)^2\begin{bmatrix}0&1&0\\0&0&0\\0&0&0\end{bmatrix},$$

したがって

$$S_xS_y-S_yS_x=(i\hbar)^2\begin{bmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}=i\hbar S_z.$$

他の交換関係についても同様. また

$$S_x{}^2=-\hbar^2\begin{bmatrix}0&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{bmatrix},\quad S_y{}^2=-\hbar^2\begin{bmatrix}-1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix},\quad S_z{}^2=-\hbar^2\begin{bmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&0\end{bmatrix}$$

であるから,

$$S_x{}^2+S_y{}^2+S_z{}^2=2\hbar^2\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix},\quad \text{つまり}\quad \mathbf{S}^2=2\hbar^2.$$

問題Ⅶ-5 〔第3版〕

無限小ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ だけ回転させられた状態に対する $\mathbf{r}$ の行列要素は, もとの状態に対する $\mathbf{r}_R=\mathbf{r}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r}$ の対応する行列要素に等しいことを証明せよ.

〔解〕 証明すべき式は

$$(U_R(\boldsymbol{\phi})\varphi(\mathbf{r}), \mathbf{r}U_R(\boldsymbol{\phi})\psi(\mathbf{r}))=(\varphi(\mathbf{r}), (\mathbf{r}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})) \qquad (1)$$

が無限小の $\boldsymbol{\phi}$ に対して成り立つということである．(27.6) および (27.7) より

$$U_R(\boldsymbol{\phi})\psi(\mathbf{r})=\psi(\mathbf{r})-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}\psi(\mathbf{r})$$

であるから，(1) の左辺は，$\boldsymbol{\phi}$ の二次以上は無視して

$$\left(\varphi(\mathbf{r})-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}\varphi(\mathbf{r}), \mathbf{r}\left(\psi(\mathbf{r})-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}\psi(\mathbf{r})\right)\right)$$

$$=(\varphi(\mathbf{r}), \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}))-\frac{i}{\hbar}(\varphi(\mathbf{r}),\ \mathbf{r}(\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}\psi(\mathbf{r}))+\frac{i}{\hbar}((\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}\varphi(\mathbf{r}), \mathbf{r}\psi(\mathbf{r})).$$

$(\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}$ はエルミット演算子であることは容易に確かめられるから，上式は

$$(\varphi(\mathbf{r}), \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}))-\frac{i}{\hbar}(\varphi(\mathbf{r}), [\mathbf{r}, (\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}]\psi(\mathbf{r}))$$

となり，$[\mathbf{r}, (\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}]=i\hbar\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r}$ であるから結局

$$(\varphi(\mathbf{r}), \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}))+(\varphi(\mathbf{r}), \boldsymbol{\phi}\times\mathbf{r}\psi(\mathbf{r}))$$

となり，(1) の右辺と等しい．

問題VII-6 ［第3版］

無限小ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ だけ回転させられた状態に対する $\mathbf{J}$ の行列要素は，もとの状態に対する $\mathbf{J}_R=\mathbf{J}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{J}$ の対応する行列要素に等しいことを証明せよ．

〔解〕 証明すべき式は無限小の $\boldsymbol{\phi}$ に対し

$$(U_R(\boldsymbol{\phi})\varphi_\alpha(\mathbf{r}), \mathbf{J}U_R(\boldsymbol{\phi})\psi_\beta(\mathbf{r}))=(\varphi_\alpha(\mathbf{r}), (\mathbf{J}+\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{J})\psi_\beta(\mathbf{r})). \qquad (1)$$

が成り立つことである．(27.12) より無限小の $\boldsymbol{\phi}$ に対し

$$U_R(\boldsymbol{\phi})\psi_\beta(\mathbf{r})=\psi_\beta(\mathbf{r})-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J})\psi_\beta(\mathbf{r})$$

であるから前問と同様にして

$$\text{左辺}=\left(\varphi_\alpha(\mathbf{r}), \left(\mathbf{J}-\frac{i}{\hbar}[\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}]\right)\psi_\beta(\mathbf{r})\right)$$

となり，$\mathbf{J}\times\mathbf{J}=i\hbar\mathbf{J}$ より $[\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}]=i\hbar\boldsymbol{\phi}\times\mathbf{J}$ が出るから，(1) の右辺と等しくなる．

問題VII-7　〔第3版〕

(27.11) で与えられた S_z の固有値は，(27.26) で与えられている $j=1$ に対する J_z の固有値と同一であることを証明せよ．次に S_z を J_z に変換する最も一般的なユニタリー行列 U (つまり $US_zU^\dagger=J_z$) を求めよ． この U が同時に S_x を J_x にかつ S_y を J_y に変換するようにこの U 中の任意のパラメータを選べ． この U は (27.8) のベクトル波動関数 ψ_α をどのように変換するか．

〔解〕

$$\det(S_z-\lambda)=-(\lambda-\hbar)\lambda(\lambda+\hbar)$$

であるから，S_z の固有値は $\hbar, 0, -\hbar$ となり J_z の固有値と一致する．次に

$$US_zU^\dagger=J_z \tag{1}$$

を満たす，最も一般的なユニタリー行列 U を求める．(1) は $US_z=J_zU$ と同値でこれを具体的に書けば

$$\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -i\hbar & 0 \\ i\hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{bmatrix}\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} \end{bmatrix}. \tag{2}$$

行列の積を遂行して，両者を比べると

$$iU_{12}=U_{11},\quad iU_{32}=-U_{31},\quad U_{13}=U_{33}=U_{22}=U_{21}=0$$

が得られ，これに U がユニタリーであること $UU^\dagger=1$ を課せば

$$|U_{11}|=1/\sqrt{2},\quad |U_{23}|=1,\quad |U_{31}|=1/\sqrt{2}$$

となるから (2) を満たす最も一般的なユニタリー行列は

$$U=\begin{bmatrix} e^{i\theta}/\sqrt{2} & -ie^{i\theta}/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\varphi} \\ e^{i\phi}/\sqrt{2} & ie^{i\phi}/\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix},\quad \theta,\varphi,\phi \text{ 実数}$$

で与えられる．さらに $US_yU^\dagger=J_y$ を課すと

$$e^{i\theta}=-e^{i\varphi},\quad e^{i\phi}=e^{i\varphi}$$

となるから

$$U=e^{i\phi}\begin{bmatrix} -1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}. \tag{3}$$

この U は $US_xU^\dagger=J_x$ をも満たしていることは $US_xU^\dagger=(i\hbar)^{-1}U[S_y, S_z]U^\dagger=(i\hbar)^{-1}$ $[US_yU^\dagger, US_zU^\dagger]=(i\hbar)^{-1}[J_y, J_z]=J_x$ よりわかる.

このUによりベクトル波動関数 $\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})$ は

$$U:\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})=\begin{bmatrix}\psi_x(\mathbf{r})\\ \psi_y(\mathbf{r})\\ \psi_z(\mathbf{r})\end{bmatrix}\to U\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})=e^{i\phi}\begin{bmatrix}(-\psi_x(\mathbf{r})+i\psi_y(\mathbf{r}))/\sqrt{2}\\ \psi_z(\mathbf{r})\\ (\psi_x(\mathbf{r})+i\psi_y(\mathbf{r}))/\sqrt{2}\end{bmatrix}$$

に変換される.

問題VII-8 〔第3版〕

(27.27) の定義と §14 で与えられた球面調和関数の定義を用いて (27.28) を確認せよ.

第2版第VI章では

問12. 方程式 [24.16] であたえられた演算子 $\boldsymbol{L}$ を直接球面調和関数に作用させることによって,方程式 [24.17] を証明せよ.*)

〔解〕 まず (27.28) の上式 [24.17] を $m\geq 0$ の場合に証明する. (14.16) [〃] より

$$J_+Y_{lm}(\theta,\phi)=(-1)^m\hbar\left[\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)P_l{}^m(\cos\theta)e^{i(m+1)\phi}. \tag{1}$$

(14.12) [〃] つまり

$$P_l{}^m(\cos\theta)=(\sin\theta)^m\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m P_l(\cos\theta)$$

より

$$\left(\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)P_l{}^m(\cos\theta)=-(\sin\theta)^{m+1}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{m+1}P_l(\cos\theta)=-P_l{}^{m+1}(\cos\theta)$$

が得られるから (1) の右辺は

$$\left[\frac{(l+m+1)!}{(l-m-1)!}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\times\hbar\times(-1)^{m+1}$$
$$\times\left[\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-m-1)!}{(l+m+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}P_l{}^{m+1}(\cos\theta)\cdot e^{i(m+1)\phi}$$

---

*) 第2版 [14.16] の Y_{lm} の定義と第3版 (14.16) の Y_{lm} の定義とでは $m\geq 0$ のとき符号因子 $(-1)^m$ だけ異なる. したがって第2版 [24.17] では m の符号により±がついてくる.

となる．前の因子は $[l(l+1)-m(m+1)]^{1/2}$ に等しいから，上式は，$Y_{l,m+1}(\theta,\phi)$ の定義式より，

$$[l(l+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m+1}(\theta,\phi)$$

となり求むる証明が得られる．

これより (27.28) の下式の $m\leq 0$ の場合が直ちに出る．なぜなら $P_l{}^m(\cos\theta)=P_l{}^{-m}(\cos\theta)$ であるから，$m\geq 0$ のとき

$$Y_{l,m}(\theta,2\pi-\phi)=(-1)^m\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}P_l{}^m(\cos\theta)e^{i(2\pi-\phi)m}$$
$$=(-1)^m\left[\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\times P_l{}^{-m}(\cos\theta)e^{-im\phi}=(-1)^mY_{l,-m}(\theta,\phi). \qquad (2)$$

上で証明された式で ϕ を $2\pi-\phi$ にかえると

$$\hbar e^{i(2\pi-\phi)}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)Y_{l,m}(\theta,2\pi-\phi)$$
$$=[l(l+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m+1}(\theta,2\pi-\phi).$$

これに（2）式を代入すると

$$-J_-(-1)^mY_{l,-m}(\theta,\phi)=[l(l+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}$$
$$\hbar(-1)^{m+1}Y_{l,-m-1}(\theta,\phi),\quad m\geq 0$$

つまり

$$J_-Y_{l,m}(\theta,\phi)=[l(l+1)-m(m-1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m-1}(\theta,\phi),\quad m\leq 0$$

が証明された．

次に (27.28) の下式で $m>0$ の場合を，上式で $m\geq 0$ の場合を用いて証明する．

$$(-1)^m\hbar\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)P_l{}^m(\cos\theta)e^{i(m+1)\phi}$$
$$=[l(l+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m+1}(\theta,\phi),\quad m\geq 0$$

の両辺に J_- を作用させると左辺は

$$(-1)^m\hbar^2\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(-\frac{d}{d\theta}-(m+1)\cot\theta\right)\left(\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)P_l{}^m(\cos\theta)e^{im\phi} \qquad (3)$$

に等しい．$P_l{}^m(w)$ は (14.9) [〃] の微分方程式を満たし $w=\cos\theta$ と変数変換すると

$$\left[\left(\frac{d}{d\theta}\right)^2+\cot\theta\frac{d}{d\theta}+l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]P_l{}^m(\cos\theta)=0$$

となる．一方

$$\left(-\frac{d}{d\theta}-(m+1)\cot\theta\right)\left(\frac{d}{d\theta}-m\cot\theta\right)$$
$$=-\left[\left(\frac{d}{d\theta}\right)^2+\cot\theta\frac{d}{d\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]-m(m+1)$$

であるから（3）は

$$(-1)^m\hbar^2\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}[l(l+1)-m(m+1)]P_l{}^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$
$$=\hbar^2[l(l+1)-m(m+1)]Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

に等しい．つまり

$$J_-[l(l+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\hbar Y_{l,m+1}(\theta,\phi)$$
$$=\hbar^2[l(l+1)-m(m+1)]Y_{l,m}(\theta,\phi),\quad m\geq 0,$$

あるいは

$$J_-Y_{l,m}(\theta,\phi)=\hbar[l(l+1)-m(m-1)]^{\frac{1}{2}}Y_{l,m-1}(\theta,\phi),\quad m>0$$

が証明されて（27.28）の下式は $m>0$ の場合に成り立つ．この式で ϕ を $2\pi-\phi$ にかえることにより（27.28）の上式［24.17］を $m<0$ の場合に証明することができる．

問題VII-9　［第3版］

J が（27.16）［24.15］の $j=\frac{1}{2}$ の式によって与えられているとき，$U_R(\boldsymbol{\phi})=\exp(-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar)$ の 2×2 行列の形での具体的表式を求めよ．ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ は，大きさ ϕ で方位角としては (θ,φ) をもつとする．先に求めた $U_R(\boldsymbol{\phi})$ の行列がユニタリーで，かつ $\phi=2\pi$ のときそれは -1 に等しいことを具体的に示せ．

［解］ $\boldsymbol{\phi}$ の成分を ϕ_x,ϕ_y,ϕ_z とすると，（27.26）［24.16］の $j=1/2$ の表より

$$-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar=-\frac{i}{2}\begin{bmatrix}\phi_z & \phi_x-i\phi_y\\ \phi_x+i\phi_y & -\phi_z\end{bmatrix}$$

となり，さらに題意より

$$\phi_x=\phi\sin\theta\cos\varphi,\quad \phi_y=\phi\sin\theta\sin\varphi,\quad \phi_z=\phi\cos\theta$$

であるから，これは

$$-\frac{i\phi}{2}\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{bmatrix}$$

に等しい．

$$A=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{bmatrix}$$

とおくと

$$A^2=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

であるから

$$A^{2n}=\mathbf{1},\quad A^{2n+1}=A\quad (n=0,1,2,\cdots\cdots)$$

となる．したがって

$$\begin{aligned}\exp[-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar]&=\exp\left[-\frac{i\phi}{2}A\right]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i\phi}{2}\right)^n A^n\\ &=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^{2n}A^{2n}-i\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^{2n+1}A^{2n+1}\\ &=\cos\frac{\phi}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}-i\sin\frac{\phi}{2}\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}\cos(\phi/2)-i\cos\theta\sin(\phi/2) & -i\sin\theta e^{-i\varphi}\sin(\phi/2)\\ -i\sin\theta e^{i\varphi}\sin(\phi/2) & \cos(\phi/2)+i\cos\theta\sin(\phi/2)\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{1}$$

を得る．この行列のエルミット共役は

$$\exp\,[-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar]^{\dagger}=\begin{bmatrix}\cos(\phi/2)+i\cos\theta\sin(\phi/2) & i\sin\theta e^{-i\varphi}\sin(\phi/2)\\ i\sin\theta e^{i\varphi}\sin(\phi/2) & \cos(\phi/2)-i\cos\theta\sin(\phi/2)\end{bmatrix}$$

であるから

$$\begin{aligned}&\exp[-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar]\exp[-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar]^{\dagger}\\ &=\begin{bmatrix}\cos^2(\phi/2)+\cos^2\theta\sin^2(\phi/2)+\sin^2\theta\sin^2(\phi/2) & 0\\ 0 & \sin^2\theta\sin^2(\phi/2)+\cos^2(\phi/2)+\cos^2\theta\sin^2(\phi/2)\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}=\mathbf{1}\end{aligned}$$

となって，$\exp[-i\boldsymbol{\phi}\cdot\mathbf{J}/\hbar]$ がユニタリー行列であることがわかる．特に $\phi=2\pi$ のとき（1）は

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}=-\mathbf{1}$$

に等しくなる．

問題VII-10　［第３版］

(27.37) および (27.40) で定義された行列 $\lambda_j (j=1, \cdots, 8)$ が交換関係 (27.41) および (27.42) を満たすことを証明せよ．次に，これらの交換関係（λ_j のもとの行列表示ではなく）を用いて，それぞれの λ_j が (27.43) で定義された Casimir 演算子 C と可換であることを示せ．

〔**解**〕 まず (27.37) および (27.40) で与えられた λ_i $(i=1, \cdots, 8)$ は

$$\mathrm{tr}(\lambda_i \lambda_j) = 2\delta_{ij} \quad (i, j=1, \cdots, 8)$$

を満たすことを示す．$i \neq j$ のとき $\mathrm{tr}(\lambda_i \lambda_j) = \mathrm{tr}(\lambda_j \lambda_i)$ であるから $i<j$ としてもよい．跡に寄与するのは $\lambda_i \lambda_j$ の対角要素であり，それが零でないのは

$$(\lambda_1\lambda_2)_{11} = i, \qquad (\lambda_1\lambda_2)_{22} = -i$$

$$(\lambda_3\lambda_8)_{11} = 1/\sqrt{3}, \qquad (\lambda_3\lambda_8)_{22} = -1/\sqrt{3}$$

$$(\lambda_4\lambda_5)_{11} = i, \qquad (\lambda_4\lambda_5)_{33} = -i$$

$$(\lambda_6\lambda_7)_{22} = i, \qquad (\lambda_6\lambda_7)_{33} = -i$$

のみであるから，$i \neq j$ のとき（１）は示された．また $\mathrm{tr}(\lambda_i^2) = 2$ も容易に示せる．（実はそうなるように λ_i を正規化している．）これより構造定数 f_{ijk} が完全反対称であることを示す．$f_{ijk} = -f_{jik}$ は明らか．(27.41) の両辺に右から λ_l を掛けて tr をとると

$$\mathrm{tr}[\lambda_i \lambda_j \lambda_l - \lambda_j \lambda_i \lambda_l] = 4i f_{ijl}.$$

ところが

$$\mathrm{tr}[\lambda_i \lambda_j \lambda_l - \lambda_j \lambda_i \lambda_l] = \mathrm{tr}[\lambda_i \lambda_j \lambda_l - \lambda_i \lambda_l \lambda_j] = \mathrm{tr}(\lambda_i [\lambda_j, \lambda_l]) = 4i f_{jli}$$

であるから $f_{ijl} = f_{jli}$．これより完全反対称性が出る．

また (27.43) で与えられる C に対して

$$[C, \lambda_j] = \sum_{i=1}^{8} [\lambda_i^2, \lambda_j] = \sum_{i=1}^{8} (\lambda_i [\lambda_i, \lambda_j] + [\lambda_i, \lambda_j] \lambda_i)$$

$$= 2i \sum_{i=1}^{8} \sum_{k=1}^{8} f_{ijk} (\lambda_i \lambda_k + \lambda_k \lambda_i)$$

となり，i と k との入れ換えに対して f_{ijk} は反対称，$\lambda_i \lambda_k + \lambda_k \lambda_i$ は対称であるからこの和は 0 となる．

(27.42) は直接計算によって確かめられる．つまり (27.42) にミスプリントはない．

問題VII-11 ［第3版］

（27.44）の8個の演算子の28個*)の交換関係を $\mathbf{r}$ と $\mathbf{p}$ の 成分間の 交換関係から算出し，その結果が（27.45）および（27.46）のとり方を採用した場合の λ_j の交換関係と一致することを証明せよ．

〔解〕

$$x=q_1,\quad y=q_2,\quad z=q_3,\quad p_x=p_1,\quad p_y=p_2,\quad p_z=p_3$$

とおく．

$$\begin{cases} a_k=\dfrac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\left(\dfrac{\alpha}{\beta}\right)^{\frac{1}{4}}q_k+i\left(\dfrac{\beta}{\alpha}\right)^{\frac{1}{4}}p_k\right] \\ a_k{}^\dagger=\dfrac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\left(\dfrac{\alpha}{\beta}\right)^{\frac{1}{4}}q_k-i\left(\dfrac{\beta}{\alpha}\right)^{\frac{1}{4}}p_k\right] \end{cases}\qquad k=1,2,3 \tag{1}$$

で $a_k, a_k{}^\dagger$ を定義すると $[q_i, p_j]=i\hbar\delta_{ij}$ より $[a_i, a_j{}^\dagger]=\delta_{ij}$, $[a_i, a_j]=[a_i{}^\dagger, a_j{}^\dagger]=0$ が出る．（第VI章§25の $a, a^\dagger$ の類似）

3×3行列の行列単位 $E^{(i,j)}$ $(i, j=1,2,3)$ （$E^{(i,j)}$ は i 行 j 列の要素が1で他は0）は交換関係

$$[E^{(i,j)}, E^{(k,l)}]=\delta_{jk}E^{(i,l)}-\delta_{li}E^{(k,j)}$$

を満たし，また $a_i{}^\dagger a_j$ $(i, j=1,2,3)$ は交換関係

$$\begin{aligned}[a_i{}^\dagger a_j,\ a_k{}^\dagger a_l]&=a_i{}^\dagger[a_j, a_k{}^\dagger]a_l-a_k{}^\dagger[a_l, a_i{}^\dagger]a_j \\ &=\delta_{jk}a_i{}^\dagger a_l-\delta_{li}a_k{}^\dagger a_j\end{aligned}$$

を満たす．すなわち $E^{(i,j)}$ と $a_i{}^\dagger a_j$ とは同じ交換関係に従う．よって証明すべきことは（27.44）の $L_x, \cdots, Q_1$ を $a_i{}^\dagger a_j$ の一次結合であらわしたとき，その係数が，（27.45），（27.46）によって対応する λ_k を $E^{(i,j)}$ の一次結合で表わしたときの係数と一致することである．（1）を逆に解くと

$$\begin{cases} q_k=\sqrt{\hbar}\left(\dfrac{\beta}{\alpha}\right)^{\frac{1}{4}}\dfrac{a_k{}^\dagger+a_k}{\sqrt{2}} \\ p_k=i\sqrt{\hbar}\left(\dfrac{\alpha}{\beta}\right)^{\frac{1}{4}}\dfrac{a_k{}^\dagger-a_k}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

であるから

*) 28個というのは ${}_8C_2$ から出てきた数字であるが，これだけの交換関係を正直に計算していてはたまらない．

$$L_x = yp_z - zp_y = q_2p_3 - q_3p_2 = i\hbar\left[\frac{(a_2^\dagger + a_2)(a_3^\dagger - a_3)}{2} - \frac{(a_3^\dagger + a_3)(a_2^\dagger - a_2)}{2}\right]$$
$$= \hbar(-ia_2^\dagger a_3 + ia_3^\dagger a_2),$$

同様に

$$L_y = \hbar(-ia_3^\dagger a_1 + ia_1^\dagger a_3),$$
$$L_z = \hbar(-ia_1^\dagger a_2 + ia_2^\dagger a_1).$$

一方（27.40）より

$$\lambda_7 = -iE^{(2,3)} + iE^{(3,2)}$$
$$\lambda_5 = iE^{(3,1)} - iE^{(1,3)}$$
$$\lambda_2 = -iE^{(1,2)} + iE^{(2,1)}$$

となり，対応関係（27.45）が示された．さらに

$$Q_{xy} = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\ (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1), \quad \lambda_1 = E^{(1,2)} + E^{(2,1)}$$
$$Q_{yz} = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\ (a_2^\dagger a_3 + a_3^\dagger a_2), \quad \lambda_6 = E^{(2,3)} + E^{(3,2)}$$
$$Q_{zx} = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\ (a_3^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_3), \quad \lambda_4 = E^{(3,1)} + E^{(1,3)}$$

であるから（27.46）の上段が示され，また

$$\frac{1}{2}(\alpha q_k^2 + \beta p_k^2) = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\alpha\beta}\left(\frac{(a_k^\dagger + a_k)(a_k^\dagger + a_k)}{2} - \frac{(a_k^\dagger - a_k)(a_k^\dagger - a_k)}{2}\right)$$
$$= \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\alpha\beta}\ (a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger) = \hbar\sqrt{\alpha\beta}\left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}\right)$$

より

$$Q_0 = \sqrt{\alpha\beta}\ \hbar\frac{1}{\sqrt{3}}(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 - 2a_3^\dagger a_3), \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}}(E^{(1,1)} + E^{(2,2)} - 2E^{(3,3)})$$
$$Q_1 = \sqrt{\alpha\beta}\ \hbar\,(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2), \quad \lambda_3 = E^{(1,1)} - E^{(2,2)}$$

が得られ（27.46）の下段が示された．

問題VII-12　［第３版］

§28の方法と公式を利用して，$j_1=\frac{3}{2}$，$j_2=\frac{1}{2}$ の場合の Clebsh-Gordan 係数の行列を計算し，その結果は一覧カードと比較せよ．

〔解〕

(m_1, m_2)	$\begin{pmatrix} j \\ m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$
$(3/2, 1/2)$	1

用いた式 (28.5)

(m_1, m_2)	$\begin{pmatrix} j \\ m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
$(3/2, -1/2)$	$1/2$	$\sqrt{3}/2$
$(1/2, 1/2)$	$\sqrt{3}/2$	$-1/2$

用いた式　(28.6)　(28.8) 上
　　　　　(28.7)　(28.8) 下

(m_1, m_2)	$\begin{pmatrix} j \\ m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
$(1/2, -1/2)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$
$(-1/2, 1/2)$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$

用いた式　(28.9) 中 (28.10) 中
　　　　　(28.9) 下 (28.10) 下

$\langle -j_1, -j_2 | j_1+j_2, -j_1-j_2 \rangle$ は実数で正とする約束だから 1，したがって

(m_1, m_2)	$\begin{pmatrix} j \\ m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix}$
$(-3/2, -1/2)$	1

(28.3) で $m_1=-j_1+1$, $m_2=-j_2$, $j=j_1+j_2$, $m=-j_1-j_2$ とおくと

$$\langle -j_1+1, -j_2 | j_1+j_2, -j_1-j_2+1 \rangle = \left(\frac{j_1}{j_1+j_2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

また $m_1=-j_1$, $m_2=-j_2+1$, $j=j_1+j_2$, $m=-j_1-j_2$ とおくと

$$\langle -j_1, -j_2+1 | j_1+j_2, -j_1-j_2+1 \rangle = \left(\frac{j_2}{j_1+j_2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

したがって

(m_1, m_2)	$\begin{pmatrix} j \\ m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
$(-1/2, -1/2)$	$\sqrt{3}/2$	a
$(-3/2, 1/2)$	$1/2$	b

となり，a と b とは (28.2) 上式の直交関係より

$$(\sqrt{3}/2)^2+a^2=1$$

$$(\sqrt{3}/2)\cdot(1/2)+ab=0$$

を満たす．$a>0$ ととる約束だから

$$a=1/2,\ b=-\sqrt{3}/2$$

となって図は完成する．

〔注意〕 この本の Clebsh-Gordan 係数の記号はあまりよくない．たとえば (28.1) での $\langle m_1m_2|jm\rangle$ は Edmonds の教科書のごとく $\langle j_1m_1j_2m_2|jmj_1j_2\rangle$ と書いた方が無用の混乱が起こらない．

問題VII-13 ［第3版］

重陽子はスピン1をもつ．Wigner-Eckart の定理を用いて，重陽子の三種類の状態：$m=1, 0, -1$ に対する電気的四重極能率の演算子 $Q(2,0)$ の期待値の比を求めよ．

〔解〕 重陽子の三つのスピン状態を $|1,1\rangle$, $|1,0\rangle$, $|1,-1\rangle$ と書く．(28.24) より

$$\langle 1,1|Q(2,0)|1,1\rangle=(-1)^{2-1+1}(2+1)^{-1/2}\langle 1\|Q(2)\|1\rangle\langle 0,1|1,1\rangle$$

$$\langle 1,0|Q(2,0)|1,0\rangle=\quad〃\quad〃\quad〃\quad\langle 0,0|1,0\rangle$$

$$\langle 1,-1|Q(2,0)|1,-1\rangle=\quad〃\quad〃\quad〃\quad\langle 0,-1|1,-1\rangle$$

となる．前問の〔注意〕にしたがえば

$$\langle 0,1|1,1\rangle=\langle 20,11|11\,;21\rangle$$

$$\langle 0,0|1,0\rangle=\langle 20,10|10\,;21\rangle$$

$$\langle 0,-1|1,-1\rangle=\langle 20,1-1|1-1\,;21\rangle$$

であるから，Clebsh-Gordan の表を見て

$$\langle 0,1|1,1\rangle=\sqrt{1/10},\ \langle 0,0|1,0\rangle=-\sqrt{2/5},\ \langle 0,-1|1,-1\rangle=\sqrt{1/10}$$

が得られるから

$$\langle 1,1|Q(2,0)|1,1\rangle:\langle 1,0|Q(2,0)|1,0\rangle:\langle 1,-1|Q(2,0)|1,-1\rangle=1:-2:1.$$

問題VII-14 ［第3版］

(29.17) にならって定義され，$U\psi_\alpha(\mathbf{p})=\psi_\alpha(-\mathbf{p})$ という性質をもつ，

運動量反転の演算子 U はユニタリーであることを証明せよ．

〔解〕

$$(U\psi_\alpha(\boldsymbol{p}), U\psi_\beta(\boldsymbol{p}))=(\psi_\alpha(-\boldsymbol{p}), \psi_\beta(-\boldsymbol{p}))=\int\psi_\alpha{}^*(-\boldsymbol{p})\psi_\beta(-\boldsymbol{p})d^3p$$

$$=\int\psi_\alpha{}^*(\boldsymbol{p})\psi_\beta(\boldsymbol{p})d^3p=(\psi_\alpha(\boldsymbol{p}), \psi_\beta(\boldsymbol{p}))$$

となって内積を変えないからユニタリー作用素である．

〔**注意**〕 内積を変えない作用素は線形である．つまり

$$(U\varphi, U\psi)=(\varphi, \psi)$$

より

$$U(a\varphi+b\psi)=aU\varphi+bU\psi \qquad a, b \text{ 複素数}$$

が出る．証明は

$$\|U(a\varphi)-aU\varphi\|^2=(U(a\varphi)-aU\varphi, U(a\varphi)-aU\varphi)$$

$$=(U(a\varphi), U(a\varphi))-(U(a\varphi), aU\varphi)-(aU\varphi, U(a\varphi))+(aU\varphi, aU\varphi)$$

$$=(a\varphi, a\varphi)-a(U(a\varphi), U\varphi)-a^*(U\varphi, U(a\varphi))+aa^*(U\varphi, U\varphi)$$

$$=aa^*\|\varphi\|^2-aa^*\|\varphi\|^2-aa^*\|\varphi\|^2+aa^*\|\varphi\|^2=0$$

より

$$U(a\varphi)=aU\varphi.$$

同様にして

$$\|U(\varphi+\psi)-U\varphi-U\psi\|^2=(U(\varphi+\psi)-U\varphi-U\psi, U(\varphi+\psi)-U\varphi-U\psi)=0$$

も示せるから

$$U(\varphi+\psi)=U\varphi+U\psi.$$

問題VII-15 ［第3版］

もしも $\psi_{\alpha'}=T\psi_\alpha$ でかつ $\psi_{\beta'}=T\psi_\beta$ であれば，$(\psi_{\alpha'}, \psi_{\beta'})=(\psi_\alpha, \psi_\beta)^*=(\psi_\beta, \psi_\alpha)$ となることを示し，このことからある状態ベクトルのノルムが時間反転によって不変であることを証明せよ．

〔解〕 (29.13) より

$$\psi_{\alpha'}=T\psi_\alpha=U\psi_\alpha{}^*,\quad \psi_{\beta'}=U\psi_\beta{}^*$$

であるから

$$(\psi_{\alpha'}, \psi_{\beta'}) = (U\psi_\alpha{}^*, U\psi_\beta{}^*) = (\psi_\alpha{}^*, \psi_\beta{}^*) = (\psi_\alpha, \psi_\beta)^* = (\psi_\beta, \psi_\alpha).$$

したがって $\alpha=\beta$ のとき

$$\|\psi_{\alpha'}\|^2 = (\psi_{\alpha'}, \psi_{\alpha'}) = (\psi_\alpha, \psi_\alpha) = \|\psi_\alpha\|^2.$$

〔注意〕

$$(T\varphi, T\psi) = (\psi, \varphi)$$

を満たす作用素は反線形，つまり

$$T(a\varphi + b\psi) = a^*T\varphi + b^*T\psi, \qquad a, b \text{ 複素数}$$

である．証明は前問の〔注意〕と同様に

$$\begin{aligned}\|T(a\varphi) - a^*T\varphi\|^2 &= (T(a\varphi) - a^*T\varphi, T(a\varphi) - a^*T\varphi)\\ &= (T(a\varphi), T(a\varphi)) - (a^*T\varphi, T(a\varphi)) - (T(a\varphi), a^*T\varphi) + (a^*T\varphi, a^*T\varphi)\\ &= (a\varphi, a\varphi) - a(T\varphi, T(a\varphi)) - a^*(T(a\varphi), T\varphi) + aa^*(T\varphi, T\varphi)\\ &= aa^*\|\varphi\|^2 - aa^*\|\varphi\|^2 - aa^*\|\varphi\|^2 + aa^*\|\varphi\|^2 = 0\end{aligned}$$

より

$$T(a\varphi) = a^*T\varphi$$

となり，また

$$T(\varphi + \psi) = T\varphi + T\psi$$

も証明できる．

問題 VII-16　［第3版］

$U = e^{-i\pi S_y/\hbar}$ が (29.19) の二つの方程式を満たすことを**具体的に**示せ．その際 S_y と演算子 $S_\pm = S_z \pm iS_x$ との交換関係を利用すること．

〔解〕

$$S_\pm = S_z \pm iS_x$$

とおくと $(S_+)^\dagger = S_-$ であり，

$$[S_+, S_y] = -\hbar S_+ \tag{1}$$

を満たす．問題 VI－7（3）式より

$$\begin{aligned}U^{-1}S_+U &= \exp[i\pi S_y/\hbar]S_+\exp[-i\pi S_y/\hbar]\\ &= S_+ + \left(\frac{-i\pi}{\hbar}\right)[S_+, S_y] + \frac{1}{2!}\left(\frac{-i\pi}{\hbar}\right)^2[[S_+, S_y], S_y] + \cdots\cdots\cdots\end{aligned}$$

となり，（1）を用いると

$$\underbrace{[\cdots\cdots}_{n\text{コ}}[[S_+, S_y], S_y,], \cdots\cdots, S_y]=(-\hbar)^n S_+$$

が得られるから

$$U^{-1}S_+U=\left(1+i\pi+\frac{(i\pi)^2}{2!}+\cdots\cdots\right)S_+=e^{i\pi}S_+=-S_+,$$

つまり $U^{-1}S_+U=-S_+$. この式のエルミート共役をとると $U^{-1}S_-U=-S_-$ となり二つあわせて（29.19）と同等である.

問題Ⅶ-17 ［第3版］

$s=\frac{1}{2}$ の場合 $e^{-i\pi S_y/\hbar}=-i\sigma_y$ となることを直接展開によって証明せよ.

〔解〕 $s=1/2$ のとき（27.30）より

$$S_y=\frac{1}{2}\hbar\sigma_y$$

である. $\sigma_y{}^2=\mathbf{1}$ より

$$(\sigma_y)^{2n}=\mathbf{1}\quad(\sigma_y)^{2n+1}=\sigma_y \qquad n=0,1,\cdots\cdots.$$

したがって

$$\exp(-i\pi S_y/\hbar)=\exp\left(-\frac{i}{2}\pi\sigma_y\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i\pi}{2}\right)^n(\sigma_y)^n$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}\left(\frac{\pi}{2}\right)^{2n}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-i\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\left(\frac{\pi}{2}\right)^{2n+1}\sigma_y$$

$$=\cos\frac{\pi}{2}\times\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-i\times\sin\frac{\pi}{2}\times\sigma_y=-i\sigma_y.$$

問題Ⅶ-18 ［第3版］

$T=UK$ という一般形および2個の逐次時間反転がある状態を自分自身にもどすこと．したがって T^2 が単位行列のある倍数であるという事実を利用する一般的議論によって $T^2=\pm1$ であることを証明せよ．その際（29.20）で与えられている T に対する特定の形式を利用しないこと.

〔解〕 問題Ⅶ-15より

$$(T^2\varphi, T^2\psi)=(T(T\varphi), T(T\psi))=(T\psi, T\varphi)=(\varphi, \psi)$$

となって T^2 はユニタリー作用素である．したがって T^2 が恒等作用素の定数倍ならその定数の絶対値は1でなければならない：

$$T^2=\alpha\mathbf{1},\quad |\alpha|=1.$$

これより

$$T^4=\alpha^2\mathbf{1}. \tag{1}$$

一方 T が反線形，つまり $T\alpha=\alpha^*T$ を用いると

$$T^4=TT^2T=T\alpha T=\alpha^*T^2=|\alpha|^2\mathbf{1}=\mathbf{1}$$

となるから（1）とあわせて $\alpha=\pm1$ となり $T^2=\pm\mathbf{1}$ が得られる．

問題VII-19 ［第3版］

スピン演算子 $\mathbf{S}$ をもつ荷電粒子が，ある電気的四重極能率演算子 $\mu\mathbf{S}$（ただし μ は定数値をとる）を保有するものと仮定する．したがって，任意の電場 $\mathbf{E}$ 内でのこの粒子に対するハミルトニアンは相互作用項 $-\mu\mathbf{S}\cdot\mathbf{E}$ を含むことになる．この粒子がある球対称の静電ポテンシャル $\phi(r)$ 内を運動するとき，たとえ何らの外部電場が存在しない場合でも，空間反転も時間反転もこの粒子に対しては対称的な操作にならないことを証明せよ．

〔解〕(24.39) で $A(\mathbf{r},t)=0$，$\phi(\mathbf{r},t)=\phi(r)$ とおき，電場は (24.30) より

$$\mathbf{E}=-\mathbf{r}\cdot\frac{\phi'(r)}{r}$$

で与えられることを用いると，ハミルトニアンは

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+e\phi(r)+\mu(\mathbf{S}\cdot\mathbf{r})\frac{\phi'(r)}{r}$$

となる．

空間反転に対しては (29.4)，(29.5)，(29.6) を用いると

$$H\to U_I{}^\dagger HU_I=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+e\phi(r)-\mu(\mathbf{S}\cdot\mathbf{r})\frac{\phi'(r)}{r}\neq H$$

となって $[U_I,H]\neq0$ であるから，U_I は対称性を保たない．

時間反転に対しては (29.14)，(29.15)，(29.18) より

$$H\to T^{-1}HT=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+e\phi(r)-\mu(\mathbf{S}\cdot\mathbf{r})\frac{\phi'(r)}{r}\neq H$$

となって $[T,H]\neq 0$ であるから T も対称性を保たない.

問題VII-20 ［第3版］

§30の議論から出発して座標表示での水素原子の最低エネルギー固有関数を求めよ．線型振動子の最低状態に対する（25.8）式に対応する方程式を求めることから進んで，次にこの方程式（25.14）との類推を使って解いてみること．

〔解〕 エネルギーの最低固有状態は（30.19）より $k=0$ の状態である．つまり $\mathbf{I}^2$ の固有値も $\mathbf{K}^2$ の固有値も0である．この状態は縮退がないから（$n^2=(2k+1)^2=1$），これを $|0\rangle$ と書く．

$$\mathbf{I}^2|0\rangle=0,\quad \mathbf{K}^2|0\rangle=0$$

より

$$I_z|0\rangle=0,\quad K_z|0\rangle=0,$$

$$I_\pm|0\rangle=0,\quad K_\pm|0\rangle=0,\quad (I_\pm=I_x\pm iI_y,\quad K_\pm=K_x\pm iK_y).$$

これより

$$L_z|0\rangle=0,\quad L_\pm|0\rangle=0\ (L_x|0\rangle=L_y|0\rangle=L_z|0\rangle=0), \tag{1}$$

$$M_z'|0\rangle=0,\quad M_\pm'|0\rangle=0\ (M_x'|0\rangle=M_y'|0\rangle=M_z'|0\rangle=0). \tag{2}$$

座標表示（$x=r\sin\theta\cos\varphi$, $y=r\sin\theta\sin\varphi$, $z=r\cos\theta$）で（1）は（14.20）より

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\langle\mathbf{r}|0\rangle=0,\quad \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\langle\mathbf{r}|0\rangle=0$$

となるから $\langle\mathbf{r}|0\rangle$ は θ にも φ にも依らない．したがって $\langle\mathbf{r}|0\rangle=f(r)$ と書く．（2）は（30.10）より

$$M_x|0\rangle=M_y|0\rangle=M_z|0\rangle=0 \tag{3}$$

と同等である．添字 x, y, z を1, 2, 3にかえると（30.5）より

$$M_i=\frac{1}{2\mu}(p_jL_k-p_kL_j-L_jp_k+L_kp_j)-\frac{\kappa}{r}x_i\quad (i,j,k):(1,2,3)\text{ の円順換}$$

となり交換関係

$$[L_i,p_j]=i\hbar p_k,\quad (i,j,k)\text{ は }(1,2,3)\text{ の円順換}$$

を用いると

$$M_i=\frac{1}{\mu}(p_jL_k-p_kL_j)-\frac{i\hbar}{\mu}p_i-\frac{\kappa}{r}x_i$$

となり，（3）は（1）に注意すると

$$\left(-\frac{i\hbar}{\mu}p_i-\frac{\kappa}{r}x_i\right)|0\rangle=0,\quad i=1,2,3$$

となる．座標表示では

$$\left(-\frac{i\hbar}{\mu}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\right)-\frac{\kappa}{r}x_i\right)f(r)=0$$

であり

$$\frac{\partial}{\partial x_i}f(r)=\frac{x_i}{r}\frac{d}{dr}f(r)$$

であるから，これは

$$\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{d}{dr}f(r)=-\kappa f(r)$$

となる．この解は

$$f(r)=Ae^{-\beta r},\quad \beta=\frac{\kappa\mu}{\hbar^2} \tag{4}$$

であり，規格化すると

$$1=\int|f(r)|^2d^3r=4\pi|A|^2\int_0^\infty e^{-2\beta r}r^2dr=\frac{|A|^2}{\beta^3}\pi$$

より

$$A=(\beta^3/\pi)^{1/2}. \tag{5}$$

（4），（5）より基底状態の規格化された波動関数は

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\kappa\mu}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\kappa\mu r/\hbar^2}$$

となり，$Z/a_0=\kappa\mu/\hbar^2$ に注意すると（16.24）の u_{100} に等しいことがわかる．

第 VIII 章

束縛状態に対する近似法

問題VIII－1　［前半は第2版，VII-問1と同一］

荷電 e の一次元調和振動子が，x 軸の正の向きの強さ E の電場によって摂動をうけている．二次の摂動での各エネルギー準位の変化を計算し，さらに誘起された電気的双極子能率を求めよ．またこの問題は正確に解けることを示し，その結果を摂動近似による結果と比較せよ．三次元の等方性振動子に対してこの種の計算を繰り返してみて，振動子の分極率 α を誘起された電気的双極子能率の E に対する比と定義するとき，エネルギーの変化は正確に $-\frac{1}{2}\alpha\mathsf{E}^2$ となることを示せ．

〔解〕（エネルギー変化）摂動のないときのハミルトニアンは

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}Kx^2=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_c{}^2x^2,\quad \omega_c=\left(\frac{K}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$

であり，$F=e\mathsf{E}$ であるから

$$H'=-e\mathsf{E}x$$

H_0 の固有関数 $|n\rangle$ $(n=0,1,2\cdots)$ は (13.13)［〃］(13.17)［〃］で与えられ，エネルギー固有値は (13.8)［〃］で与えられ，$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c$ である．(31.14)［25.14］から E_n の変化 ΔE_n は摂動の二次までとって

$$\Delta E_n=\langle n|H'|n\rangle+\mathsf{S}_{m'}\frac{|\langle n|H'|m\rangle|^2}{E_n-E_m}\qquad(1)$$

で与えられるが，(13.18)［13.18］から0にならない行列要素は次の二通りである．

$$\langle n|H'|n-1\rangle=-\frac{e\mathsf{E}}{\alpha}\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\qquad \alpha=\left(\frac{m\omega_c}{\hbar}\right)^{1/2}$$

$$\langle n|H'|n+1\rangle=-\frac{e\mathsf{E}}{\alpha}\left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

したがってこれらを（1）に代入して

$$\Delta E_n = -\frac{e^2\mathsf{E}^2}{2m\omega_c{}^2} = -\frac{e^2\mathsf{E}^2}{2K} \qquad (n=0,1,2,\cdots\cdots)$$

（電気的双極子能率）摂動を考慮に入れた波動関数は（31.9）[25.6]，（31.10）[25.9] から

$$\psi_1 = \mathsf{S}_{k}{}' \frac{\langle k|H'|n\rangle}{E_n - E_k} u_k = \frac{e\mathsf{E}}{\alpha\hbar\omega_c}\left[\left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}} u_{n+1} - \left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}} u_{n-1}\right]$$

したがって

$$\psi = u_n + \frac{e\mathsf{E}}{\alpha\hbar\omega_c}\left[\left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}} u_{n+1} - \left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}} u_{n-1}\right]$$

電気的双極子能率は ex の期待値を求めればよいので

$$\langle ex\rangle = \frac{(\psi, ex\psi)}{(\psi,\psi)}$$

$$= \left[1 + \left(\frac{e\mathsf{E}}{\alpha\hbar\omega_c}\right)^2 \frac{2n+1}{2}\right]^{-1} \times \frac{e\mathsf{E}}{\alpha\hbar\omega_c}\left[2\left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\langle n|ex|n+1\rangle - 2\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\langle n|ex|n-1\rangle\right]$$

$$= \left[1 + \left(\frac{e\mathsf{E}}{\alpha\hbar\omega_c}\right)^2 \frac{2n+1}{2}\right]^{-1} \times \frac{e^2\mathsf{E}}{\alpha^2\hbar\omega_c} = \frac{e^2\mathsf{E}}{\alpha^2\hbar\omega_c} = \frac{e^2\mathsf{E}}{K}$$

ただし摂動の定義から E は小さいので E^2 より先の項は無視した．

（摂動計算によらぬ方法）摂動を含めた全ハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2 - e\mathsf{E}x = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}K\left(x - \frac{e\mathsf{E}}{K}\right)^2 - \frac{e^2E}{2K}$$

となるので，ここで $x' = x - \dfrac{e\mathsf{E}}{K}$ とおくと

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx'^2 - \frac{e^2\mathsf{E}}{2K}$$

となるが，これは摂動のない場合のハミルトニアンに一定の値 $-\dfrac{e^2\mathsf{E}}{2K}$ を加えたにすぎないから，エネルギー変化は $\Delta E = -\dfrac{e^2\mathsf{E}}{2K}$．二次までの摂動計算はここで求めた正確な値と一致する．

（三次元の場合）ハミルトニアンは

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kr^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}K(x^2+y^2+z^2)$$

$$H' = -e\mathsf{E}x$$

であるが，ここで x, y, z について変数分離すれば，摂動の加わるのは x 成分についてのみであるが，この計算は全く一次元の場合と変わらないので，エネルギー変化は

$$\Delta E_{n_x n_y n_z} = -\frac{e^2 \mathsf{E}^2}{2m\omega_c^2} = -\frac{e^2 \mathsf{E}^2}{2K}$$

で与えられる．

（分極率）分極率 α を電気的双極子能率と電場の強さ E との比で定義すれば

$$\alpha = \frac{\langle ex \rangle}{\mathsf{E}} = \frac{e^2 \mathsf{E}}{K}\frac{1}{\mathsf{E}} = \frac{e^2}{K}$$

したがって

$$\Delta E_n = -\frac{e^2 \mathsf{E}^2}{2K} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{K}\mathsf{E}^2 = -\frac{1}{2}\alpha \mathsf{E}^2$$

となることがわかる．

問題VIII-2　［第2版，VII-問2と同一］

一次元調和振動子が付加的なポテンシャルエネルギー bx^3 による摂動をうけている．各エネルギー準位の変化を二次の摂動で計算せよ．

〔**解**〕ハミルトニアンは

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2$$

$$H' = bx^3$$

であり，摂動二次までのエネルギー変化は（31.14）［25.14］で与えられ

$$\Delta E_n = \langle n|H'|n\rangle + S_m{}' \frac{|\langle n|H'|m\rangle|^2}{E_n - E_m} \tag{1}$$

である．ここで行列要素 $\langle n|H'|m\rangle$ を求めるには $\langle n|x^3|m\rangle$ を知らねばならぬが，

$$\langle n|x^3|m\rangle = \sum_i \langle n|x|i\rangle\langle i|x^2|m\rangle$$

として（13.18）［〃］および問題IV-3の結果を使うか，または

$$= \sum_{i,j} \langle n|x|i\rangle\langle i|x|j\rangle\langle j|x|m\rangle$$

として（13.18）［〃］を使って計算すればよい．これから零でない行列要素として

$$\langle n|x^3|n-3\rangle = \frac{1}{2\alpha^3}\left[\frac{n(n-1)(n-2)}{2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle n|x^3|n-1\rangle = \frac{3}{2\alpha^3} n \left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle n|x^3|n+1\rangle=\frac{3}{2\alpha^3}(n+1)\left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle n|x^3|n+3\rangle=\frac{1}{2\alpha^3}\left[\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

が得られ，他は零である．これを（1）に代入すると

$$\Delta E_n=-\frac{b^2\hbar^2}{8mK^2}(30n^2+30n+11)$$

問題Ⅷ-3　［第2版，Ⅶ-問3と類似］

$n=3$ の状態の水素原子に対する一次の Stark 効果を求めよ．なお，エネルギー準位の配置の略図を描き，各準位に付随している量子数を記入せよ．

〔解〕 $n=3$ の状態は $(l,m)=(2,2),(2,1),(2,0),(2,-1),(2,-2)$；$(1,1),(1,0),(1,-1)$；$(0,0)$ の9重に縮退している．摂動は (31.26) [25.25] *) により

$$H'=e\mathcal{E}z=e\mathcal{E}r\cos\theta$$

である．また $\cos\theta=(4\pi/3)^{1/2}Y_{10}(\theta,\phi)$ なので，(31.26) 以下の説明または後の注の議論によって，$\langle lm|H'|l'm'\rangle$ は $m=m'$, $l=l'$, $l'\pm1$ 以外では零になることがわかる．また $l=l'$ のときはパリティを考慮して $\langle lm|H'|lm\rangle=0$ である．したがって零でない行列要素は

$$\langle 0,0|H'|1,0\rangle,\ \langle 1,0|H'|2,0\rangle,$$

$$\langle 1,1|H'|2,1\rangle,\langle 1,\ -1|H'|2,-1\rangle\quad \text{およびこれらの複素共役}$$

のみである．

ここで上の各行列要素を計算しておく．まず角部分は (14.16) [〃] の下の形を使うか，（注）の公式を使うことにより，

$$\int d\Omega\, Y_{00}{}^*(\theta,\phi)\cos\theta Y_{10}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\int_0^\pi\sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\cos^2\theta=\sqrt{\frac{1}{3}}$$

同様に

$$\int d\Omega\, Y_{10}{}^*(\theta,\phi)\cos\theta Y_{20}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{4}{15}}$$

$$\int d\Omega Y_{1\pm1}{}^*(\theta,\phi)\cos\theta Y_{2\pm1}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{1}{5}}$$

*) 第2版では e を電子の電荷としているので H' に負の符号がついているが同じことである．

ただし　$d\Omega=\sin\theta d\theta d\phi$.

また動径部分は（16.24）［〃］およびその下の式を使うと，$n=3$, $Z=1$ とおいて

$$\int_0^\infty r^2 dr R_{30}(r) r R_{31}(r)=\frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{9\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\times\int_0^\infty dr r^3 e^{-\rho}(6-6\rho+\rho^2)(4-\rho)\rho=-9\sqrt{2}\,a_0$$

同様に

$$\int_0^\infty r^2 dr R_{31}(r) r R_{32}(r)=-\frac{9\sqrt{5}}{2}a_0$$

さてこれらから求まる行列要素を使って，（31.27）と同様にすれば９行９列の永年方程式が得られるが，mの値が異なる行列要素は零となるので，mの値によってそれぞれの部分行列式に分かれる．

（エネルギー固有値）

1）　$m=\pm 2$ では $W_1=0$

2）　$m=\pm 1$ については

$$\begin{vmatrix} -W_1 & \langle 1,\pm 1|H'|2,\pm 1\rangle \\ \langle 2,\pm 1|H'|1,\pm 1\rangle & -W_1 \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} -W_1 & -\frac{9}{2}e\mathrm{E}a_0 \\ -\frac{9}{2}e\mathrm{E}a_0 & -W_1 \end{vmatrix}=0$$

から

$$W_1=\pm\frac{9}{2}e\mathrm{E}a_0$$

3）　$m=0$ については

$$\begin{vmatrix} -W_1 & \langle 00|H'|10\rangle & 0 \\ \langle 10|H'|00\rangle & -W_1 & \langle 10|H'|20\rangle \\ 0 & \langle 20|H'|10\rangle & -W_1 \end{vmatrix}$$

$$=\begin{vmatrix} -W_1 & -9\sqrt{\frac{2}{3}}e\mathrm{E}a_0 & 0 \\ -9\sqrt{\frac{2}{3}}e\mathrm{E}a_0 & -W_1 & -\frac{9}{\sqrt{3}}e\mathrm{E}a_0 \\ 0 & -\frac{9}{\sqrt{3}}e\mathrm{E}a_0 & -W_1 \end{vmatrix}=0$$

から

$$W_1=0,\ \pm 9e\mathcal{E}a_0$$

（固 有 関 数）

1）　$m=\pm 2$ のときは元のままで $|2,\pm 2\rangle$

2）　$m=\pm 1$ のとき

固有関数を $a|1,\pm 1\rangle+b|2,\pm 1\rangle$ とすれば

$$-W_1a-\frac{9}{2}e\mathcal{E}a_0b=0$$

$$-\frac{9}{2}e\mathcal{E}a_0a-W_1b=0$$

から

$$W_1=\frac{9}{2}e\mathcal{E}a_0 \quad \text{のとき} \quad a=-b=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|1,\ \pm 1\rangle-\frac{1}{\sqrt{2}}|2,\pm 1\rangle$$

同様に

$$W_1=-\frac{9}{2}e\mathcal{E}a_0 \quad \text{のとき} \quad a=b=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|1,\ \pm 1\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|2,\pm 1\rangle$$

3）　$m=0$ のとき

上と同様にして

$W_1=0$ のとき　　$\frac{1}{\sqrt{3}}[|0,0\rangle-\sqrt{2}|2,0\rangle]$

$W_1=9e\mathcal{E}a_0$ のとき　$\frac{1}{\sqrt{6}}[\sqrt{2}|0,0\rangle-\sqrt{3}|1,0\rangle+|2,0\rangle]$

$W_1=-9e\mathcal{E}a_0$ のとき　$\frac{1}{\sqrt{6}}[\sqrt{2}|0,0\rangle+\sqrt{3}|1,0\rangle+|2,0\rangle]$

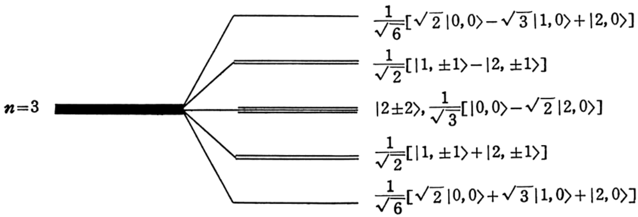


図 15

〔注〕

行列成分を計算するとき，角度 θ, ϕ の積分で

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y^*{}_{l_1m_1}(\theta,\phi) Y_{lm}(\theta,\phi) Y_{l_2m_2}(\theta,\phi) \tag{1}$$

の形の積分があらわれることがあるが，この積分は Clebsh-Gordan 係数を使って表わすことができるので，その結果を与えておこう（Clebsh-Gordan 係数の表わし方については問題VII-12の注意参照）．まずそのために

$$Y_{lm}(\theta,\phi) Y_{l'm'}(\theta,\phi) = \sum_{LM} \left\{ \frac{(2l+1)(2l'+1)}{4\pi(2L+1)} \right\}^{\frac{1}{2}} \times \langle l0l'0 | L0ll' \rangle \langle lml'm' | LMll' \rangle Y_{LM}(\theta,\phi) \tag{2}$$

が成り立つことに注意する．この式は群論では既知の式だが直接出すこともできる

いま

$$f_{LM}(\theta,\phi) = \sum_{mm'} \langle lml'm' | LMll' \rangle Y_{lm}(\theta,\phi) Y_{l'm'}(\theta,\phi) \tag{3}$$

とおいてこれに $J_z, \boldsymbol{J}^2, J_+, J_-$ を作用させるとどうなるか調べてみる．Clebsh-Gordan 係数に関する漸化式（28.3），（28.4）および同じようにして求まる漸化式

$$[L(L+1)-l(l+1)-l'(l'+1)-2mm']\langle lml'm' | LMll' \rangle$$
$$= \sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\sqrt{l'(l'+1)-m'(m'+1)}\,\langle l, m-1, l', m'+1 | LMll' \rangle$$
$$+ \sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\sqrt{l'(l'+1)-m'(m'-1)}\,\langle l, m+1, l', m'-1 | LMll' \rangle$$

の助けを借りると

$$\begin{aligned} J_z f_{LM}(\theta,\phi) &= M\hbar f_{LM}(\theta,\phi) \\ \boldsymbol{J}^2 f_{LM}(\theta,\phi) &= L(L+1)\hbar^2 L_{LM}(\theta,\phi) \\ J_\pm f_{LM}(\theta,\phi) &= \sqrt{L(L+1)-M(M\pm1)}\,\hbar\, f_{LM\pm1}(\theta,\phi) \end{aligned} \tag{4}$$

が導かれるので $f_{LM}(\theta,\phi)$ は定数係数を除いて $Y_{LM}(\theta,\phi)$ と同じであり，特に最後の式が成り立つことからこの係数は M に無関係であることがわかる．

$$f_{LM}(\theta,\phi) = C(L, ll') Y_{LM}(\theta,\phi)$$

この係数は M によらぬので（3）式で $M=0$, $\theta=0$ としてみると

$$C(L, ll')\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} = \langle l0l'0 | LMll' \rangle \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}}$$

したがってこれから定まる $C(Ll, l')$ を（3）に代入して

$$\langle l0l'0 | L0ll' \rangle \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{4\pi(2L+1)}} Y_{LM}(\theta,\phi)$$

$$=\sum_{mm'}\langle lml'm'|LMll'\rangle Y_{lm}(\theta,\phi)Y_{l'm'}(\theta,\phi)$$

この両辺に $\langle lml'm'|LMll'\rangle$ をかけて LMに関する和をとれば，Clebsh-Gordan 係数の直交性から（2）が得られる．この式を使えば（1）式は

$$\sum_{LM}\left\{\frac{(2l+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}\langle l0l_20|L0ll_2\rangle\langle lml_2m_2|LMll_2\rangle$$

$$\times\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi Y^*{}_{l_1m_1}(\theta,\phi)Y_{LM}(\theta,\phi)$$

$$=\left\{\frac{(2l+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_1+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}\langle l0l_20|l_10ll_2\rangle\langle lml_2m_2|l_1m_1ll_2\rangle\delta_{m_1,m+m_2}$$

したがって

$$\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,Y^*{}_{l_1m_1}Y_{lm}Y_{l_2m_2}=\left\{\frac{(2l+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_1+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\times\langle l0l_20|l_10ll_2\rangle\langle lml_2m_2|l_1m_1ll_2\rangle$$

ただし　$m_1=m+m_2,\ \ |l-l_2|\le l_1\le l+l_2$　以外では0

たとえばこれから

$\langle l_1m_1|Y_{1m}|l_2m_2\rangle$ は $m_1-m_2=m,\ l_1=l_2, l_2\pm1$ 以外では0であることがわかる．また x, y, z の行列要素の角部分は，

$$x=r\sin\theta\cos\phi=r\sin\theta\frac{1}{2}(e^{i\phi}+e^{-i\phi})=r\left(\frac{2}{3}\pi\right)^{\frac{1}{2}}[-Y_{11}+Y_{1-1}]$$

$$y=r\sin\theta\sin\phi=r\sin\theta\frac{1}{2i}(e^{i\phi}-e^{-i\phi})=ri\left(\frac{2}{3}\pi\right)^{\frac{1}{2}}[+Y_{11}+Y_{1-1}]$$

$$z=r\cos\theta=r\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}}Y_{10}$$

だから $\langle l_1m_1|Y_{1\pm1}|l_2m_2\rangle$, $\langle l_1m_1|Y_{10}|l_2m_2\rangle$ を求めることに帰着する．

これを使えば

$$\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,Y_{lm}^*(\theta,\phi)\cos\theta Y_{l+1,m'}(\theta,\phi)$$

$$=\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,Y_{lm}^*(\theta,\phi)Y_{10}(\theta,\phi)Y_{l+1,m'}(\theta,\phi)$$

$$=\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}}\left\{\frac{(2+1)(2l+3)}{4\pi(2l+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}\langle 1,0l+1,0|l,01,l+1\rangle\langle 1,0,l+1m'|lm1,l+1\rangle$$

$$=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}}\,\delta_{m,m'}$$

問題VIII-4 ［第2版，VII-問4と類似］

三つの無摂動状態をもつある系は，摂動をうけたハミルトニアン行列

$$\begin{bmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{bmatrix}$$

であらわされる．ただし $E_2>E_1$. 量aおよびbは摂動と見なされるべきものであるが，それらは同じオーダーで，E_2-E_1 に比べれば小さいとする．縮退のない場合の二次の摂動理論を使って摂動系の固有値を求めよ（この手続きは正しいか）．次に，行列を対角化して正確な固有値を求めよ．最後に，縮退のある場合の二次の摂動論を使い，得られた三つの結果を比較せよ．

〔解〕**（縮退のない摂動論）** 摂動のないときのエネルギー E_1, E_1, E_2 の状態を $|1\rangle$, $|2\rangle, |3\rangle$ とする．摂動二次までのエネルギーは (31.14) [25.14] で与えられる．ハミルトニアンは

$$H=\begin{bmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{bmatrix}=H_0+H'=\begin{bmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a^* & b^* & 0 \end{bmatrix}$$

となるから，H' の零でない行列要素は

$$\langle 1|H'|3\rangle=\langle 3|H'|1\rangle^*=a$$

$$\langle 2|H'|3\rangle=\langle 3|H'|2\rangle^*=b$$

である．したがってこれを (31.14) [25.14] に代入して

$$W^{(1)}=E_1+\frac{|\langle 1|H'|3\rangle|^2}{E_1-E_2}=E_1+\frac{|a|^2}{E_1-E_2}$$

$$W^{(2)}=E_1+\frac{|\langle 2|H'|3\rangle|^2}{E_1-E_2}=E_1+\frac{|b|^2}{E_1-E_2}$$

$$W^{(3)}=E_2+\frac{|\langle 3|H'|1\rangle|^2}{E_2-E_1}+\frac{|\langle 3|H'|2\rangle|^2}{E_2-E_1}=E_2+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2-E_1}$$

となる．ただし $W^{(1)}, W^{(2)}$ については和のとり方からわかるように正しくない方法である．

（行列の対角化） 固有方程式

$$\begin{vmatrix} E_1-W & 0 & a \\ 0 & E_1-W & b \\ a^* & b^* & E_2-W \end{vmatrix}=0$$

を解くと

$$W=E_1,\ \frac{1}{2}[E_1+E_2\pm\sqrt{(E_2-E_1)^2+4(|a|^2+|b|^2)}]$$

a,b が E_2-E_1 に比べて小さいとすれば

$$\sqrt{(E_2-E_1)^2+4(|a|^2+|b|^2)}=E_2-E_1+\frac{2(aa^*+bb^*)}{E_2-E_1}$$

となるので，この近似のもとで

$$W^{(1)}=E_1,\ W^{(2)}=E_1-\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2-E_1},\quad W^{(3)}=E_2+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2-E_1}$$

が得られる．

（縮退のある場合の摂動論） $|1\rangle$, $|2\rangle$ が縮退していることを考慮して (31.20) [25.24] を適用する．$|3\rangle$ に対しては縮退のない場合の方法でよい．

$$\begin{vmatrix} \dfrac{|\langle 1|H'|3\rangle|^2}{E_1-E_2}-W_2 & \dfrac{\langle 1|H'|3\rangle\langle 3|H'|2\rangle}{E_1-E_2} \\ \dfrac{\langle 2|H'|3\rangle\langle 3|H'|1\rangle}{E_1-E_2} & \dfrac{|\langle 2|H'|3\rangle|^2}{E_1-E_2}-W_2 \end{vmatrix}=0$$

を解けば

$$W_2=0,\ \frac{|a|^2+|b|^2}{E_1-E_2}$$

したがって

$$W^{(1)}=E_1,\ W^{(2)}=E_1-\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2-E_1},\ W^{(3)}=E_2+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2-E_1}$$

以上から縮退していないエネルギー状態に対しては答えは同じになるが，縮退している状態に対しては，その縮退を考慮しないと正しい答えが得られないことがわかる．

問題VIII-5　［第2版，VII-問9と類似］

試験関数 ψ はある固有関数 u_E から少しだけ異なっていて，$\psi=u_E+\epsilon\psi_1$ とかけるとする．ただし，u_E と ψ_1 は規格化されていて，$\epsilon\ll 1$ である．$\langle H\rangle$ は E と ϵ^2 のオーダーの項だけ異なることを示し，その項を求めよ．

〔解〕

$$\langle H\rangle=\frac{(\psi,H\psi)}{(\psi,\psi)},\quad \psi=u_E+\epsilon\psi_1$$

また　題意により $(u_E, u_E)=1$，$(\psi_1, \psi_1)=1$ である．

$$(\psi, H\psi)=(u_E+\epsilon\psi_1,\ H(u_E+\epsilon\psi_1))$$
$$=(u_E, Hu_E)+\epsilon[(u_E, H\psi_1)+(\psi_1, Hu_E)]+\epsilon^2(\psi_1, H\psi_1)$$
$$=E\{1+\epsilon[(u_E, \psi_1)+(\psi_1, u_E)]\}+\epsilon^2(\psi_1, H\psi_1)$$
$$(\psi, \psi)=(u_E+\epsilon\psi_1, u_E+\epsilon\psi_1)$$
$$=1+\epsilon[(u_E, \psi_1)+(\psi_1, u_E)]+\epsilon^2$$

ただし H がエルミット演算子であるから $(u_E, H\psi_1)=(Hu_E, \psi_1)=E(u_E, \psi_1)$ であることを用いた．さて上の式を $\langle H\rangle$ に代入して ϵ^2 の項までとると，

$$\langle H\rangle=\frac{E\{1+\epsilon[(u_E, \psi_1)+(\psi_1, u_E)]\}+\epsilon^2(\psi_1, H\psi_1)}{1+\epsilon[(u_E, \psi_1)+(\psi_1, u_E)]+\epsilon^2}$$
$$=E+\epsilon E[(u_E, \psi_1)+(\psi_1, u_E)]+\epsilon^2(\psi_1, H\psi_1)-\epsilon E[(u_E, \psi_1)+(\psi_1, u_E)]$$
$$-\epsilon^2E[(u_E, \psi_1)+(\psi_1, u_E)]^2-\epsilon^2E+\epsilon^2E[(u_E, \psi_1)+(\psi_1, u_E)]^2$$
$$=E+\epsilon^2[(\psi_1, H\psi_1)-E]$$

したがって $\langle H\rangle$ には ϵ の項はあらわれず，E とのずれは ϵ^2 の大きさでその係数は

$$(\psi_1, H\psi_1)-E$$

である．

問題Ⅷ-6　［第2版，Ⅶ-問10と同一］

ある特定のハミルトニアンの最初の $(n-1)$個の固 有関数が知られているとき，n 番目のエネルギー準位に対する上限を得るのに使える変分法の試験関数の形式的表現を示せ．

〔解〕　ハミルトニアンに縮退がないとし

$$H|n\rangle=E_n|n\rangle \quad n=1, 2, \cdots\cdots$$
$$E_1<E_2<\cdots\cdots$$

とおく．任意の波動関数 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle=\sum_{k=1} a_k|k\rangle$$

と表わされるので

$$\langle H\rangle\equiv\langle\psi|H|\psi\rangle=\sum_{k=1} E_k|a_k|^2$$

が成立する．いまここで ψ が u_k $(k=1, 2, \cdots, n-1)$ と直交するとすると，

$$\langle\psi|k\rangle=0,\quad k=1,2,\cdots\cdots,n-1 \tag{1}$$

すなわち

$$a_k=0,\quad k=1,2,\cdots\cdots,n-1$$

$$|\psi\rangle=\sum_{k\geqq n}a_k|k\rangle,\quad \langle\psi|\psi\rangle=\sum_{k\geqq n}|a_k|^2$$

が成り立つので

$$\langle H\rangle=\langle\psi|H|\psi\rangle=\sum_{k=1}E_k|a_k|^2=\sum_{k\geqq n}E_k|a_k|^2\geqq E_n\sum_{k\geqq n}|a_k|^2=E_n\langle\psi|\psi\rangle$$

したがって

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\geqq E_n \tag{2}$$

が得られるので E_n の上限が求まる.

いま必ずしも u_k $(k=1,2,\cdots,n-1)$ と直交するとは限らない任意の波動関数 $|\phi\rangle$ が与えられたとき，Schmidt の直交化（問題Ⅲ-1参照）によって u_k $(1\leq k\leq n-1)$ と直交する波動関数を得ることができる．すなわち

$$|\psi\rangle=|\phi\rangle-\sum_{k=1}^{n-1}\langle k|\phi\rangle|k\rangle$$

なる波動関数を作ると，これは（1）を満たすことがわかる．したがって（2）から E_n の上限が得られる.

問題Ⅷ-7　［第2版，Ⅶ-問11と同一］

(32.12)［27.12］式の展開における次の項（R^{-4} のオーダーの）を求めよ．摂動のない基底状態に対するそれらの行列の対角要素は零となって， van der Waals の相互作用への逆四乗に比例する寄与はないことを示せ.

〔解〕

$$(1+x)^{-\frac{1}{2}}=1-\frac{1}{2}x+\frac{3}{8}x^2-\frac{5}{16}x^3+O(x^4)$$

を用いて (32.12)［27.12］のかっこ内を展開し R^{-3} の項をとり出せば簡単に求まるが，H' が

$$H'=\frac{e^2}{|\boldsymbol{R}|}+\frac{e^2}{|\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|}-\frac{e^2}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_1|}-\frac{e^2}{|\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r}_2|} \tag{1}$$

と書けるので，ベクトルの関数について成り立つ式

$$f(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})=f(\boldsymbol{R})+\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{grad}\,f(\boldsymbol{R})+\frac{1}{2!}(\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{grad})^2 f(\boldsymbol{R})+\frac{1}{3!}(\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{grad})^3 f(\boldsymbol{R})+\cdots\cdots$$

から得られる式，

$$\frac{1}{|\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r}|}=\frac{1}{R}+\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{grad}\frac{1}{R}+\frac{1}{2!}(\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{grad})^2\frac{1}{R}+\frac{1}{3!}(\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{grad})^3\frac{1}{R}+\cdots\cdots \qquad (2)$$

または

$$\frac{1}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}=\frac{1}{R}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r}{R}\right)^l P_l(\cos\theta) \qquad \begin{array}{l} R=|\boldsymbol{R}|>|\boldsymbol{r}|=r \\ \theta\text{は}\boldsymbol{R}\text{と}\boldsymbol{r}\text{の間の角}\end{array} \qquad (3)$$

を使って求めることもできる．この場合は第一項は R^{-1} の項，第二項は R^{-2} の項，……となっている．したがって R^{-4} の項をとりだすには，たとえば（2）を使えば第四項をとり出して $\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{r}'$，$\boldsymbol{R}=(0,0,R)$ として，

$$\begin{aligned}
&\frac{e^2}{3!}(\boldsymbol{r}'\cdot\mathrm{grad})^3\frac{1}{R}-\frac{e^2}{3!}(-\boldsymbol{r}_1\cdot\mathrm{grad})^3\frac{1}{R}-\frac{e^2}{3!}(\boldsymbol{r}_2\cdot\mathrm{grad})^3\frac{1}{R}\\
&=\frac{e^2}{3!}\left[9\frac{(\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{r}')(\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{R})}{R^5}-15\frac{(\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{R})^3}{R^7}\right]\\
&\quad-\frac{e^2}{3!}\left[15\frac{(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{R})^3}{R^7}-9\frac{(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{R})}{R^5}\right]\\
&\quad-\frac{e^2}{3!}\left[9\frac{(\boldsymbol{r}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)(\boldsymbol{r}_2\cdot\boldsymbol{R})}{R^5}-15\frac{(\boldsymbol{r}_2\cdot\boldsymbol{R})^3}{R^7}\right]\\
&=\frac{e^2}{R^4}\cdot\frac{3}{2}[r_1{}^2z_2-r_2{}^2\cdot z_1+(2x_1x_2+2y_1y_2-3z_1z_2)(z_1-z_2)]
\end{aligned}$$

が得られる．この各項は $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2$ の奇関数なので u_0 $(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ についての期待値は零である．

問題Ⅷ-8 ［第2版，Ⅶ-問12と同一］

(32.13)［27.13］の級数で，零にならない最初の項を使って $-W(R)$ に対する下限を求めよ．この結果を，変分法計算による結果と比較せよ．

〔解〕 (32.12)［27.12］の H' を直交座標と極座標であらわしておく．

$$\begin{aligned}
H'&=\frac{e^2}{R^3}(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2)\\
&=\frac{e^2}{R^3}r_1r_2\left[\sin\theta_1\sin\theta_2\frac{1}{2}(e^{i\phi_1}e^{-i\phi_2}+e^{-i\phi_1}e^{i\phi_2})-2\cos\theta_1\cos\theta_2\right]
\end{aligned}$$

$$=\frac{e^2}{R^3}r_1r_2\left[-\frac{4}{3}\pi(Y_{1-1}^{(1)*}Y_{11}^{(2)*}+Y_{11}^{(1)*}Y_{1-1}^{(2)*})-\frac{8}{3}\pi Y_{10}^{(1)*}Y_{10}^{(2)*}\right] \quad (1)$$

基底状態を $u_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=u_{100}(\boldsymbol{r}_1)u_{100}(\boldsymbol{r}_2)\equiv|0\rangle$ とすると，$\langle 0|H'|0\rangle=0$ であることがわかるが，二つの電子の内一方が $n=1$ の状態にあれば $\langle 0|H'|n\rangle=0$ となるので，(32.13) [27.13] の和で零にならない最初の項は両方の電子がともに $n=2$ の状態にあるものである．ここで $u_{2lm}(\boldsymbol{r}_1)u_{2l'm'}(\boldsymbol{r}_2)\equiv|lm,l'm'\rangle$ とする．

$$u_{100}(\boldsymbol{r})=R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi)=\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}2e^{-r/a_0}\cdot\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$u_{210}(\boldsymbol{r})=R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}e^{-r/2a_0}\cdot\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta$$

$$u_{21\pm1}(\boldsymbol{r})=R_{21}(r)Y_{1\pm1}(\theta,\varphi)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}e^{-r/2a_0}\cdot\mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$u_{200}(\boldsymbol{r})=R_{20}(r)Y_{00}(\theta,\varphi)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\cdot\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

さて行列要素 $\langle 0|H'|lm,l'm'\rangle$ の θ,φ についての積分を考えると，零とならない行列要素は

$$\langle 0|H'|10,10\rangle,\ \langle 0|H'|11,1-1\rangle,\ \langle 0|H'|1-1,11\rangle$$

であることがわかる．

したがって (32.13) [27.13] から

$$-W(R)=-\mathrm{S}_n{}'\frac{|\langle 0|H'|n\rangle|^2}{E_0-E_n}$$

$$\geqq-\frac{1}{E_0-E_1}[|\langle 0|H'|10,10\rangle|^2+|\langle 0|H'|11,1-1\rangle|^2+|\langle 0|H'|1-1,11\rangle|^2]$$

$$E_0=-\frac{e^2}{2a_0}\times 2,\ \ E_1=-\frac{e^2}{8a_0}\times 2 \quad (2)$$

まず

$$\langle 0|H'|10,10\rangle=\int d\boldsymbol{r}_1\int d\boldsymbol{r}_2u_{100}{}^*(\boldsymbol{r}_1)u_{100}{}^*(\boldsymbol{r}_2)H'u_{210}(\boldsymbol{r}_1)u_{210}(\boldsymbol{r}_2)$$

H' の内 $x_1x_2+y_1y_2$ の項は零になるので残る積分は

$$=-2\frac{e^2}{R^3}\int d\boldsymbol{r}_1\int d\boldsymbol{r}_2u_{100}{}^*(\boldsymbol{r}_1)u_{100}{}^*(\boldsymbol{r}_2)z_1z_2u_{210}(\boldsymbol{r}_1)u_{210}(\boldsymbol{r}_2)$$

$$=-2\frac{e^2}{R^3}\left[\int d\boldsymbol{r}_1u_{100}{}^*(\boldsymbol{r}_1)r_1\cos\theta_1u_{210}(\boldsymbol{r}_1)\right]\times$$

$$\times\left[\int d\boldsymbol{r}_2 u_{100}{}^*(\boldsymbol{r}_2) r_2\cos\theta_2 u_{210}(\boldsymbol{r}_2)\right]$$

ここで

$$\int d\boldsymbol{r}_1 u_{100}{}^*(\boldsymbol{r}_1) r_1\cos\theta_1 u_{210}(\boldsymbol{r}_1)=\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}2\cdot\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{a_0\sqrt{3}}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\times\int_0^\infty dr_1\int_0^\pi d\theta_1\int_0^{2\pi} d\phi_1 e^{-r/a_0}\cdot r_1\cos\theta_1\cdot r_1 e^{-r/2a_0}\cos\theta_1 r_1{}^2\sin\theta_1$$

$$=\frac{1}{2^{\frac{5}{2}}\pi a_0{}^4}2\pi\int_0^\infty dr_1\int_0^\pi d\theta_1 r_1{}^4 e^{-r/a_0}e^{-r/2a_0}\cos^2\theta_1\sin\theta_1$$

$$=\frac{1}{2^{\frac{5}{2}}\pi a_0{}^4}\cdot 2\pi\cdot\frac{2}{3}\left(\frac{2}{3}a_0\right)^5 4!$$

$\boldsymbol{r}_2$ の積分も同じであるから，これらを $\langle 0|H'|10,10\rangle$ の式に代入すると

$$\langle 0|H'|10,10\rangle=-2\frac{e^2}{R^3}\left[\frac{1}{2^{\frac{5}{2}}\pi a_0{}^4}\cdot 2\pi\cdot\frac{2}{3}\left(\frac{2}{3}a_0\right)^5 4!\right]^2=-\frac{2^{16}}{3^{10}}\frac{e^2a_0{}^2}{R^3}$$

同様の計算を遂行すれば

$$\langle 0|H'|11,1-1\rangle=\langle 0|H'|1-1,11\rangle=-\frac{2^{15}}{3^{10}}\frac{e^2a_0{}^2}{R^3}$$

が得られるので，（2）に代入して

$$-W(R)\geqq-\left[-\frac{e^2}{2a_0}\times 2+\frac{e^2}{8a_0}\times 2\right]^{-1}$$

$$\times\left[\left(\frac{2^{16}}{3^{10}}\frac{e^2a_0{}^2}{R^3}\right)^2+\left(\frac{2^{15}}{3^{10}}\frac{e^2a_0{}^2}{R^3}\right)^2+\left(\frac{2^{15}}{3^{10}}\frac{e^2a_0{}^2}{R^3}\right)^2\right]=\frac{2^{33}}{3^{20}}\frac{e^2a_0{}^5}{R^6}$$

したがって

$$-W(R)\geqq 2.5\frac{e^2a_0{}^5}{R^6}$$

この結果は（32.21）にくらべると大部精度が悪い．

〔**注意**〕 H' を（1）にあるように Y_{lm} で表わしておくと行列要素の角部分は簡単に求まる．たとえば $\langle 0|H'|10,10\rangle$ の角部分は $\sin\theta d\theta d\phi=d\Omega$ として

$$\int d\Omega_1\int d\Omega_2 Y_{00}^{(1)*}Y_{00}^{(2)*}\left[-\frac{4}{3}\pi\left(Y_{1-1}^{(1)*}Y_{11}^{(2)*}+Y_{11}^{(1)*}Y_{1-1}^{(2)*}\right)-\frac{8\pi}{3}Y_{10}^{(1)*}Y_{10}^{(2)*}\right]Y_{10}^{(1)}Y_{10}^{(2)}$$

Y_{00} が定数であることと，Y_{lm} の直交性を使うと

$$=\frac{1}{4\pi}\cdot\left(-\frac{8\pi}{3}\right)\left[\int d\Omega_1 Y_{10}^{(1)*}Y_{10}^{(1)}\right]\times\left[\int d\Omega_2 Y_{10}^{(2)*}Y_{10}^{(2)}\right]$$

$$=\frac{1}{4\pi}\cdot\left(-\frac{8\pi}{3}\right)\cdot 1\cdot 1=-\frac{2}{3}$$

または問題VIII-3の注にある方法を使ってもよい．

問題VIII-9　［第2版，VII-問13に対応］

van der Waals 相互作用に関連して，§32［27］で採用した摂動論と変分法とを組合せた方法を使って，基底状態にある水素原子の帯電率の上限を求めよ．

〔**解**〕 帯電率は電場をかけたときのエネルギー変化を調べればよいので，ハミルトニアンは

$$H_0=-\frac{p^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}$$

$$H'=e\mathrm{E}z=e\mathrm{E}r\cos\theta$$

である．

（**摂動論**） 基底状態は $|0\rangle=(\pi a_0{}^3)^{1/2}e^{-r/a_0}$ であり H' は奇関数なので

$$\langle 0|H'|0\rangle=0$$

したがって（32.14）［27.14］を導いたときと同じ議論によって

$$-W(R)\leqq\frac{\langle 0|H'^2|0\rangle}{E_1-E_0} \tag{1}$$

ただし　$E_1=-\dfrac{e^2}{8a_0}$，　$E_0=-\dfrac{e^2}{2a_0}$

$$\langle 0|H'^2|0\rangle=\langle 0|e^2\mathrm{E}^2r^2\cos^2\theta|0\rangle$$

$$=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\int e^{-r/a_0}e^2\mathrm{E}^2r^2\cos^2\theta e^{-r/a_0}d^3r$$

$$=\frac{1}{\pi a_0{}^3}e^2\mathrm{E}^2\cdot 2\pi\int_0^\infty r^2drr^2e^{-2r/a_0}\int_0^\pi d\theta\sin\theta\cos^2\theta$$

$$=a_0{}^2e^2\mathrm{E}^2$$

したがってこれらを（1）に代入して

$$-W(R)\leqq\frac{8a_0}{3e^2}a_0{}^2e^2\mathrm{E}^2=\frac{1}{2}\left(\frac{16}{3}a_0{}^3\right)\mathrm{E}^2$$

（33.8）および問題VIII-1から $W_2=-\dfrac{1}{2}\alpha E^2$ の関係があるので

$$\frac{1}{2}\alpha E^2 \leqq \frac{1}{2}\left(\frac{16}{3}a_0{}^3\right)\mathsf{E}^2$$

したがって

$$\alpha \leqq \frac{16}{3}a_0{}^3$$

（変分法） 試験関数として

$$\psi(r) = u_{100}(r)(1+AH') = (\pi a_0)^{-\frac{1}{2}}e^{-r/a_0}(1+Ae\mathsf{E}r\cos\theta)$$

をとる．(32.5) [27.5] を使うと (32.17) [27.17] を導いたと同様にして

$$E_0 + W(R) \leqq \frac{\langle\psi|H_0+H'|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$= \frac{\langle 0|(1+AH')(H_0+H')(1+AH')|0\rangle}{\langle 0|(1+AH')(1+AH')|0\rangle}$$

$$= \frac{\langle 0|H_0|0\rangle + 2A\langle 0|H'^2|0\rangle + A^2\langle 0|H'H_0H'|0\rangle}{\langle 0|0\rangle + A^2\langle 0|H'^2|0\rangle} \qquad (2)$$

ただしここで $|0\rangle = u_{100}(r)$ であり，$\langle 0|H'|0\rangle = \langle 0|H'^3|0\rangle = \langle 0|H_0H'|0\rangle = \langle 0|H'H_0|0\rangle = 0$ であることを使った．A は実数としてあるが，一般に複素数としても結果は同じである．さて（2）で

$$\langle 0|0\rangle = 1,\ \langle 0|H_0|0\rangle = E_0 = -\frac{e^2}{2a_0},\ \langle 0|H'^2|0\rangle = a_0{}^2e^2\mathsf{E}^2$$

であるが，$\langle 0|H'H_0H'|0\rangle$ は

$$\langle 0|H'H_0H'|0\rangle = \frac{1}{\pi a_0{}^3}e^2\mathsf{E}^2\int e^{-r/a_0}r\cos\theta\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}\right)r\cos\theta e^{-r/a_0}d^3r$$

を計算して求めなければならないが，（注意）

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

であるから

$$\nabla^2(r\cos\theta e^{-r/a_0}) = e^{-r/a_0}\cos\theta\left(-\frac{4}{a_0} + \frac{r}{a_0{}^2}\right)$$

したがって

$$\int e^{-r/a_0}r\cos\theta\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 r\cos\theta e^{-r/a_0}\right)d^3r$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\mu}\int e^{-r/a_0}r\cos\theta\cdot e^{-r/a_0}\cos\theta\left(\frac{4}{a_0} - \frac{r}{a_0{}^2}\right)d^3r = \frac{\pi}{2}e^2a_0{}^4$$

また

$$\int e^{-r/a_0} r\cos\theta\left(-\frac{e^2}{r}\right)r\cos\theta\, e^{-r/a_0}d^3r=-\frac{\pi}{2}e^2a_0^4$$

したがって

$$\langle 0|H'H_0H'|0\rangle=0$$

が得られる．これらの結果を（2）に代入すれば，

$$E_0+W(R)\leqq\frac{-\dfrac{e^2}{2a_0}+2Aa_0^2e^2\mathsf{E}^2}{1+A^2a_0^2e^2\mathsf{E}^2}$$

右辺の最小値を求めて，E が小さいことを考慮すれば，

$$E_0+W(R)\leqq\frac{1}{2}\left[-\frac{e^2}{2a_0}-\sqrt{\left(\frac{e^2}{2a_0}\right)^2+4a^2e^2\mathsf{E}^2}\right]=-\frac{e^2}{2a_0}-2a_0^3\mathsf{E}^2$$

すなわち

$$W(R)\leqq-2a_0^3\mathsf{E}^2=-\frac{1}{2}(4a_0^3)\mathsf{E}^2$$

または，

$$\alpha\geqq 4a_0^3$$

以上を合わせると

$$4a_0^3\leqq\alpha\leqq\frac{16}{3}a_0^3$$

〔注意〕 積分を計算しないで $\langle 0|H'H_0H'|0\rangle$ を求めることもできる．

まず

$$[H',H_0]=\frac{e\mathsf{E}}{2\mu}[z,p_z^2]=\frac{e\mathsf{E}}{\mu}i\hbar p_z$$

$$[p_z,H']=-i\hbar e\mathsf{E}$$

に注意して

$$\langle 0|H'H_0H'|0\rangle=\langle 0|H_0H'^2|0\rangle+\langle 0|[H',H^0]H'|0\rangle$$

$$=E_0\langle 0|H'^2|0\rangle+\frac{e\mathsf{E}}{\mu}i\hbar\langle 0|p_zH'|0\rangle$$

同様にして

$$\langle 0|H'H_0H'|0\rangle=E_0\langle 0|H'^2|0\rangle-\frac{e\mathsf{E}}{\mu}i\hbar\langle 0|H'p_z|0\rangle$$

この二式を加えて

$$2\langle 0|H'H_0H'|0\rangle = 2E_0\langle 0|H'^2|0\rangle + \frac{e\mathsf{E}}{\mu} i\hbar\langle 0|[p_z, H']0\rangle$$

$$= 2E_0\langle 0|H'^2|0\rangle + \frac{e^2\mathsf{E}^2}{\mu}\hbar^2\langle 0|0\rangle$$

$$= -\frac{e^2}{a_0}e^2\mathsf{E}^2 a_0{}^2 + \frac{e^2\mathsf{E}^2}{\mu}\hbar^2 = 0 \qquad \left(a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)$$

問題Ⅷ-10　［第2版，Ⅶ-問14と同一］

質量 m の粒子がポテンシャル $V(r) = -V_0 e^{-r/a}$ によって束縛されているとする．ただし $V_0 = \hbar^2/\frac{3}{4}ma^2$ 試験関数を $e^{-\alpha r}$ とする変分法を使って，最低のエネルギー固有値のよい限界値を求めよ．

〔**解**〕 ハミルトニアンは

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V_0 e^{-r/a}$$

試験関数

$$\psi = e^{-\alpha r}$$

は $r \to \infty$ で $\psi \to 0$ だから $\alpha > 0$ である．最低エネルギー準位に対して (32.5) [27.5] より，

$$E_0 \leq \frac{\int e^{-\alpha r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V_0 e^{-r/a}\right)e^{-\alpha r} d^3\boldsymbol{r}}{\int e^{-\alpha r}\cdot e^{-\alpha r} d^3\boldsymbol{r}} \tag{1}$$

ここで

$$\int e^{-2\alpha r} d^3\boldsymbol{r} = 4\pi\int_0^\infty r^2 dr e^{-2\alpha r} = 4\pi\cdot\left(\frac{1}{2\alpha}\right)^3\cdot 2$$

また

$$\nabla^2 e^{-\alpha r} = -\alpha\left(\frac{2}{r} - \alpha\right)e^{-\alpha r}$$

であるから

$$\int e^{-\alpha r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V_0 e^{-r/a}\right)e^{-\alpha r} d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\int e^{-\alpha r}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\alpha\left(\frac{2}{r}-\alpha\right)-V_0e^{-r/a}\right]e^{-\alpha r}d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\frac{\pi\hbar^2}{2m\alpha}-V_0\frac{8\pi}{\left(\frac{1}{a}+2\alpha\right)^3}$$

これを（1）に代入して

$$E_0\leq\frac{\frac{\pi\hbar^2}{2m\alpha}-V_0\frac{8\pi}{\left(\frac{1}{a}+2\alpha\right)^3}}{4\pi\cdot\left(\frac{1}{2\alpha}\right)^3\cdot 2}=\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2-V_0\frac{(2\alpha)^3}{\left(\frac{1}{a}+2\alpha\right)^3}$$

$$=\frac{V_0}{8}\left[\frac{\hbar^2}{ma^2V_0}(2a\alpha)^2-8\left(\frac{2a\alpha}{1+2a\alpha}\right)^3\right]$$

$\hbar^2/mV_0a^2=3/4$ を使い，$x=2a\alpha$ とおくと

$$=\frac{V_0}{8}\left[\frac{3}{4}x^2-8\left(\frac{x}{1+x^3}\right)^3\right],\quad x>0$$

右辺の最小値は $x=1$ のとき $-\dfrac{V_0}{32}$ であるから

$$E_0\leq-\frac{V_0}{32}$$

問題VIII-11　［第3版］

強さ E の一様な電場内に 1 個の水素原子がおかれている．（33.6）を使って，核の位置における全電場を計算せよ．この答えについて物理的な用語による定性的な議論を行なえ．

〔解〕 $\boldsymbol{r}$ の点にある電子が原点にある原子核のところに作る電場 $\boldsymbol{E}^e$ は，

$$\boldsymbol{E}^e=(E_x{}^e,E_y{}^e,E_z{}^e)=\left(+\frac{e}{r^2}\sin\theta\cos\phi,\ +\frac{e}{r^2}\sin\theta\sin\phi,\ +\frac{e}{r^2}\cos\theta\right)$$

である．電子の波動関数 ψ として（33.6）を使い，$\boldsymbol{E}^e$ の期待値を求める．ψ には ϕ が含まれていないので，ϕ の積分を考えれば

$$E_x=\int\psi^*E_x{}^e\psi d^3\boldsymbol{r}=0$$

$$E_y=\int\psi^*E_y{}^e\psi d^3\boldsymbol{r}=0$$

したがって零でないのは E_z のみである．ただしここで $\int\psi^*\psi dr^3=1+0(E^2)$ なので 1 とした．

$$E_z=\int\psi^* E_z{}^e\psi d^3r=\int\psi^*\left(+\frac{e}{r^2}\cos\theta\right)\psi d^3r$$

$$=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\int_0^r r^2dr\int_0^\pi \sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi e^{-r/a_0}\left[1-\frac{\mathsf{E}}{e}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)\cos\theta\right]\left(+\frac{e}{r^2}\cos\theta\right)$$

$$\times\left[1-\frac{\mathsf{E}}{e}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)\cos\theta\right]e^{-r/a_0}$$

$$=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\, e^{-2r/a_0}$$

$$\times\left[1+\frac{\mathsf{E}^2}{e^2}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)^2\cos^2\theta-\frac{2\mathsf{E}}{e}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)\cos\theta\right]\left(\frac{e}{r^2}\cos\theta\right)$$

かっこの中の第 3 項しかきかぬので

$$=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\cdot e\cdot\left(-2\frac{\mathsf{E}}{e}\right)\int_0^r r^2dr\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\, e^{-2r/a_0}\frac{1}{r^2}\cos^2\theta\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)$$

$$=-\mathsf{E}$$

外場は z 方向大きさ E であるから，全電場は結局，

$$E_z+\mathsf{E}=-\mathsf{E}+\mathsf{E}=0$$

となる．この結果は古典論でいえば，原点に電荷 e，外場が z 方向に E であるとき電子 $-e$ は，$-z$ 方向の

$$-e\mathsf{E}+\frac{e^2}{r^2}=0$$

で決まる位置でつり合うことになるが， これから $r^2=e/\mathsf{E}$ となるので， 電子が原点に作る電場は $\dfrac{-e}{r^2}=-\mathsf{E}$ となり，原点においてこれは外場の効果を打ち消す． このことが量子論の場合にも起こっている．

問題VIII-12 ［第 3 版］

(33.6) を利用して，一様な電場によって水素原子中に誘起される電気的双極子能率を計算し，次に分極率を求めよ．さらに，分極率，電場の強さおよびエネルギーの変化は (33.8) 式で結びつけられることを証明せよ．

〔**解**〕 電子の位置を $\boldsymbol{r}=(x, y, z)$ とすると誘起された電気双極子能率 $\boldsymbol{d}=(d_x, d_y, d_z)$ は次の量

$$-e\boldsymbol{r}=(-ex,-ey,-ez)=(-er\sin\theta\cos\phi,-er\sin\theta\sin\phi,-er\cos\theta)$$

の期待値を（33.6）を使って計算すればよい．前問と同様にして $\int\psi^*\psi d^3r=1$ として計算するが，ϕ についての積分から

$$d_x=\langle -er\sin\theta\cos\phi\rangle=0,\quad d_y=\langle -er\sin\theta\sin\phi\rangle=0$$

がわかる．

$$\begin{aligned}
d_z&=\int\psi^*(-er\cos\theta)\psi d^3r\\
&=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\int e^{-r/a_0}\left[1-\frac{\mathsf{E}}{e}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)\cos\theta\right](-er\cos\theta)e^{-r/a_0}\\
&\qquad\times\left[1-\frac{\mathsf{E}}{e}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)\cos\theta\right]d^3r\\
&=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi e^{-2r/a_0}\\
&\qquad\times\left[1+\frac{\mathsf{E}^2}{e^2}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)^2\cos^2\theta-\frac{2\mathsf{E}}{e}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)\cos\theta\right]\\
&\qquad\times(-er\cos\theta)
\end{aligned}$$

θ 積分から積分はかっこ［　］の中の第三項しかきかぬことがわかるので

$$\begin{aligned}
&=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\cdot(-e)\cdot\left(\frac{-2\mathsf{E}}{e}\right)\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi e^{-2r/a_0}\left(a_0r+\frac{1}{2}r^2\right)r\cos^2\theta\\
&=\frac{9}{2}a_0{}^3\mathsf{E}
\end{aligned}$$

これから分極率 α は

$$\alpha=d_z/\mathsf{E}=\frac{9}{2}a_0{}^3$$

であり，エネルギー変化は（33.7）から $W_2=-\frac{9}{4}\mathsf{E}^2a_0{}^3$ であるので，W_2 と α は

$$W_2=-\frac{1}{2}\alpha\mathsf{E}^2$$

の関係にあることがわかる．

問題VIII-13　［第3版］

水素原子が四重極の対称性をもつ静電ポテンシャル内におかれている．（33.21）式を利用して，核の無限小近傍につくられる全四重極ポテンシャルの強さの外部四重極ポテンシャルとの比を計算せよ．

〔解〕 点$(x, y, z)\equiv(x_1, x_2, x_3)$における四重極対称なポテンシャルによる相互作用は

$$H=\sum_{ij} D_{ij}x_ix_j=\sum_{ij}\frac{1}{2}\phi_{ij}(3x_ix_j-r^2\delta_{ij}) \tag{1}$$

という形をしている．ところで原点の近傍 $\boldsymbol{\varepsilon}=(\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z)=(\varepsilon\sin\alpha\cos\beta, \varepsilon\sin\alpha\sin\beta, \varepsilon\cos\alpha)$ にある電荷 $+e$ と，z 軸上 $R\gg\varepsilon$ にある電荷 Ze との相互作用は

$$\frac{Ze^2}{(R^2+\varepsilon^2-2R\varepsilon\cos\alpha)^{\frac{1}{2}}}=\frac{Ze^2}{R}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{\varepsilon}{R}\right)^l P_l(\cos\alpha)$$

であるが，$l=2$ の項は

$$H=\frac{Ze^2}{R}\left(\frac{\varepsilon}{R}\right)^2 P_2(\cos\alpha)=\frac{Ze^2}{R^3}\frac{1}{2}(3\varepsilon_z{}^2-\varepsilon^2) \tag{2}$$

となり，これはちょうど（1）で $\phi_{33}=\dfrac{Ze^2}{R^3}$，他の $\phi_{ij}=0$ とおいたものにあたっている．そこでこの相互作用を外場の四重極対称なポテンシャルによる相互作用として採用する．

また $\boldsymbol{r}$ に存在する電子と $\boldsymbol{\varepsilon}$ に存在する電荷 e との間の相互作用は $\varepsilon<r\ll R$ として

$$\frac{-e^2}{\sqrt{r^2+\varepsilon^2-2r\varepsilon\cos(\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}})}}=-\frac{e^2}{r}\sum_{l=0}\left(\frac{\varepsilon}{r}\right)^l P_l(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}}) \tag{3}$$

ただし $\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}}$ は $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}$ とのなす角

だが，電子の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ を使ってこの期待値をとったものが，ポテンシャルの実際の効果を与える．その結果（1）の形であるためには ε について2次でなければならないので

$$-\frac{e^2}{r}\left(\frac{\varepsilon}{r}\right)^2 P_2(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}})$$

である．

さて四重極対称な外場のもとでの電子に対するハミルトニアンは（33.18）において $l=2$ の項で与えられるので，本文の議論からこの電子に対する波動関数のゆがみは（33.21）で $l=2$ の項をとりだしたもの

$$\langle \boldsymbol{r}|1\rangle=\frac{Z}{R^3(\pi a_0{}^3)^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{a_0r^2}{2}+\frac{r^3}{3}\right)e^{-r/a_0}P_2(\cos\theta)$$

で与えられ，全体の波動関数は

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(\pi a_0{}^3)^{\frac{1}{2}}}e^{-r/a_0}\left[1+\frac{Z}{R^3}\left(\frac{a_0r^2}{2}+\frac{r^3}{3}\right)P_2(\cos\theta)\right]$$

である．したがって

$$\left\langle -\frac{e^2}{r}\left(\frac{\varepsilon}{r}\right)^2 P_2(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}})\right\rangle = \int d^3r\,\psi^*(r)\left[-\frac{e^2}{r}\left(\frac{\varepsilon}{r}\right)^2 P_2(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}})\right]\psi(\boldsymbol{r})$$

$$= \frac{1}{\pi a_0{}^3}\int_0^\infty r^2 dr\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi} d\phi e^{-r/a_0}\left[1+\frac{Z}{R^3}\left(\frac{a_0 r^2}{2}+\frac{r^3}{3}\right)P_2(\cos\theta)\right]$$

$$\times\left[-\frac{e^2\varepsilon^2}{r^3}P_2(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}})\right]\times e^{-r/a_0}\left[1+\frac{Z}{R^3}\left(\frac{a_0 r^2}{2}+\frac{r^3}{3}\right)P_2(\cos\theta)\right]$$

ところでこの積分の角部分は

$$P_l(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}}) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_m Y_{lm}{}^*(\theta,\phi)Y_{lm}(\alpha,\beta)$$

および

$$\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi} d\phi Y_{2m}(\theta,\phi)=0,\quad P_l(\cos\theta)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,Y_{l0}(\theta,\phi)$$

を使うと

$$\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi} d\phi\, P_2(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}}) = \frac{4\pi}{5}\sum_m Y_{2m}(\alpha,\beta)\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi\, Y_{2m}{}^*(\theta,\phi)=0$$

$$\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi} d\phi\, P_2(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}})P_2(\cos\theta)$$

$$= \frac{4\pi}{5}\sum_m\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\,Y_{2m}(\alpha,\beta)\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi\, Y_{2m}{}^*(\theta,\phi)Y_{20}(\theta,\phi)$$

$$= \frac{4\pi}{5}\sum_m\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\,Y_{2m}(\alpha,\beta)\cdot\delta_{m,0} = \frac{4\pi}{5}\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\,Y_{20}(\alpha,\beta) = \frac{4\pi}{5}P_2(\cos\alpha)$$

となるので，結局

$$\left\langle -\frac{e^2\varepsilon^2}{r^3}P_2\,(\cos\widehat{\boldsymbol{r\varepsilon}})\right\rangle = -\frac{1}{\pi a_0{}^3}\cdot 2Z e^2\varepsilon^2\cdot\frac{4\pi}{5}P_2(\cos\alpha)\frac{1}{R^3}$$

$$\times\int_0^\infty \frac{dr}{r}e^{-2r/a_0}\left(\frac{a_0 r^2}{2}+\frac{r^3}{3}\right)+O\left(\frac{1}{R^6}\right)$$

$$= -\frac{1}{3}\frac{Ze^2}{R^3}\varepsilon^2 P_2(\cos\alpha) \qquad (4)$$

これは予想されたように（1），（2）と同じ形をしている．

したがって原子核の近傍での，外場と電子による全四重極ポテンシャルの効果は（2），（4）を加えて

$$\frac{2}{3}\frac{Ze^2}{R^3}\varepsilon^2 P_2(\cos\alpha)$$

外場によるものは（2）で与えられるからこれらの比は

3 : 2

である.

〔注意〕 $\left\langle -\frac{e^2}{r}\left(\frac{\varepsilon}{r}\right)^2 P_2(\cos\widehat{r\varepsilon})\right\rangle$ を求める積分で $P_2(\cos\theta)$ の入らぬ項は $P_2(\cos\widehat{r\varepsilon})$ の積分が零になるので落したが，しかし動径部分には $r\sim 0$ で発散する積分

$$\int_0^\infty r^2 dr e^{-2r/a_0}\frac{1}{r^3}$$

があらわれている．これが現われた原因は $r\sim 0$ でも（つまり $r<\varepsilon$）でも（3）式を使用したことによる．$r>\varepsilon$ のはずだから，この困難を避けるには，原点を中心に ε を含む小さい球をとり，その外側で積分し，その後その球を小さくすればよい．このとき ε も小さくなるが，上に求めた比はかわらない．

問題Ⅷ-14　［第3版］

（31.2）の ψ_s を $|s\rangle$ と書くことにして，（31.4）と（31.6）から次の公式を証明せよ．

$$\langle s|H'|r\rangle=\sum_{q=0}^{s}\sum_{p=0}^{r}W_{q+p+1}\langle s-q|r-p\rangle$$

この公式を使って，（33.17）式を導け．

(D. H. Smith の私信による).

〔解〕（31.4）より

$$H_0|r+1\rangle+H'|r\rangle=\sum_{i=0}^{r+1}W_i|r+1-i\rangle \tag{1}$$

$$\langle s|H_0+\langle s-1|H'=\sum_{j=0}^{s}W_j\langle s-j| \tag{2}$$

それぞれ（1）式と $|s\rangle$，（2）式と $|r+1\rangle$ の内積を作り，両式の引き算をすると

$$\langle s|H'|r\rangle-\langle s-1|H'|r+1\rangle=\sum_{i=0}^{r+1}W_i\langle s|r+1-i\rangle-\sum_{j=0}^{s}W_j\langle s-j|r+1\rangle$$

ここで $s\to s-t$，$r\to r+t$ の置き換えをすると，

$$\langle s-t|H'|r+t\rangle-\langle s-t-1|H'|r+t+1\rangle$$
$$=\sum_{i=0}^{r+t+1}W_i\langle s-t|r+t+1-i\rangle-\sum_{j=0}^{s-t}W_j\langle s-t-j|r+t+1\rangle$$

この両辺を $t=0,1,2,\cdots,\ s-1$ として加える．このとき $t=s-1$ で左辺に $\langle 0|H'|r+s\rangle$ が現われるが (31.7)(31.6) より

$$\langle 0|H'|r+s\rangle=-\langle 0|H_0|r+s+1\rangle+W_{r+s+1}\langle 0|0\rangle=W_{r+s+1}\langle 0|0\rangle$$
$$=\sum_{i=0}^{r+s+1} W_i\langle s-s|r+s+1-i\rangle$$

に注意すると

$$\langle s|H'|r\rangle-\sum_{i=0}^{r+s+1} W_i\langle s-s|r+s+1-i\rangle=\sum_{t=0}^{s-1}\sum_{i=0}^{r+t+1} W_i\langle s-t|r+t+1-i\rangle$$
$$-\sum_{t=0}^{s-1}\sum_{j=0}^{s-t} W_j\langle s-t-j|r+t+1\rangle$$

したがって

$$\langle s|H'|r\rangle=\sum_{t=0}^{s}\sum_{i=0}^{r+t+1} W_i\langle s-t|r+t+1-i\rangle-\sum_{t=0}^{s-1}\sum_{j=0}^{s-t} W_j\langle s-t-j|r+t+1\rangle$$

ここで右辺の第二項の和のとり方を変えることにより，第一項の和の一部と打ち消し合うことを示そう．

右辺第二項で $j+t=k$ と置き換えると，t を固定したとき

$$t\leqq j+t\leqq (s-t)+t=s$$

から $t\leqq k\leqq s$ となるので右辺第二項は

$$-\sum_{t=0}^{s-1}\sum_{k=t}^{s} W_{k-t}\langle s-k|r+t+1\rangle$$

となる．また $t\leqq k\leqq s,\ 0\leqq t\leqq s-1$ から，k を固定したとき現われる t の値は $0\leqq t\leqq k$ であるから，和の順序を入れかえて

$$-\sum_{k=0}^{s}\sum_{t=0}^{k} W_{k-t}\langle s-k|r+t+1\rangle$$

ここで $k-t=i$ と置き換えると，$0\leqq i\leqq k$ だから

$$-\sum_{k=0}^{s}\sum_{i=0}^{k} W_i\langle s-k|r+k+1-i\rangle$$

したがって

$$\langle s|H'|r\rangle=\sum_{t=0}^{s}\sum_{i=0}^{r+t+1} W_i\langle s-t|r+t+1-i\rangle-\sum_{k=0}^{s}\sum_{i=0}^{k} W_i\langle s-k|r+k+1-i\rangle$$
$$=\sum_{t=0}^{s}\sum_{i=t+1}^{r+t+1} W_i\langle s-t|r+t+1-i\rangle$$

$i-t-1=j$ とおいて

$$=\sum_{t=0}^{s}\sum_{j=0}^{r}W_{t+j+1}\langle s-t|r-j\rangle$$

となり結局

$$\langle s|H'|r\rangle=\sum_{q=0}^{s}\sum_{p=0}^{r}W_{q+p+1}\langle s-q|r-p\rangle$$

$\langle 0|1\rangle=0, \langle 0|0\rangle=1$ に注意して $s=r=1$ とおくと

$$\begin{aligned}\langle 1|H'|1\rangle&=\sum_{q=0}^{1}\sum_{p=0}^{1}W_{p+q+1}\langle 1-q|1-p\rangle\\&=W_1\langle 1|1\rangle+W_2\langle 1|0\rangle+W_2\langle 0|1\rangle+W_3\langle 0|0\rangle\\&=W_1\langle 1|1\rangle+W_3\end{aligned}$$

また $s=r=0$ とおくと

$$\langle 0|H'|0\rangle=W_1\langle 0|0\rangle=W_1$$

したがって

$$W_3=\langle 1|H'|1\rangle-\langle 1|1\rangle\langle 0|H'|0\rangle$$

問題Ⅷ-15　［第3版］

一定距離 R に固定されている1個の水素原子と1個の点荷電 Ze の三次の摂動エネルギーの，R の大きな値に対する主要項を計算せよ．

〔解〕 W_3 は (33.17) で与えられるが，H' の形 (33.18) を考慮すると $\langle 0|H'|0\rangle$ の角部分の積分は

$$\int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta\, P_l(\cos\theta)=0 \qquad l\geq 1$$

から零となるので

$$\langle 0|H'|0\rangle=0$$

したがって (33.18)，(33.21) より

$$\begin{aligned}W_3&=\langle 1|H'|1\rangle\\&=\sum_{l_1=1}^{\infty}\sum_{l_2=1}^{\infty}\sum_{l_3=1}^{\infty}\int_0^{\infty}r^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\\&\qquad\times\left[\frac{Z}{R^{l_1+1}(\pi a_0{}^3)^{1/2}}\left(\frac{a_0 r^{l_1}}{l_1}+\frac{r^{l_1+1}}{l_1+1}\right)e^{-r/a_0}P_{l_1}(\cos\theta)\right]\end{aligned}$$

$$\times\left[-\frac{Ze^2}{R}\left(\frac{r}{R}\right)^{l_2}P_{l_2}(\cos\theta)\right]\times\left[\frac{Z}{R^{l_3+1}(\pi a_0{}^3)^{1/2}}\left(\frac{a_0 r^{l_3}}{l_3}+\frac{r^{l_3+1}}{l_3+1}\right)e^{-r/a_0}P_{l_3}(\cos\theta)\right]$$

この中で $1/R$ の次数の一番低い項は $l_1=l_2=l_3=1$ から出てくる $(1/R)^6$ の項であるが，角部分の積分が

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta[P_1(\cos\theta)]^3=\int_0^\pi \sin\theta d\theta \cos^3\theta=0$$

となるので，R^{-6} の項の寄与はない．

次に R^{-7} の項は $(l_1, l_2, l_3)=(1,1,2)$，$(1,2,1)$，$(2,1,1)$ の三項の寄与からなり角度部分の積分は，いずれも

$$\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi}d\phi P_2(\cos\theta)\,[P_1(\cos\theta)]^2=2\pi\int_{-1}^1 dx\frac{1}{2}(3x^2-1)x^2=\frac{8}{15}\pi$$

となり動径部分の積分は

$$R(l_1,l_2,l_3)\equiv\int_0^\infty r^2dr\left(\frac{a_0 r^{l_1}}{l_1}+\frac{r^{l_1+1}}{l_1+1}\right)e^{-r/a_0}\,r^{l_2}\left(\frac{a_0 r^{l_3}}{l_3}+\frac{r^{l_3+1}}{l_3+1}\right)e^{-r/a_0}$$

$\rho=\dfrac{2}{a_0}r$ とおいて

$$=\left(\frac{a_0}{2}\right)^{l_1+l_2+l_3+5}\int_0^\infty d\rho\,\rho^{l_2+2}\left(\frac{2}{l_1}\rho^{l_1}+\frac{\rho^{l_1+1}}{l_1+1}\right)\left(\frac{2}{l_3}\rho^{l_3}+\frac{\rho^{l_3+1}}{l_3+1}\right)e^{-\rho}$$

$$=\left(\frac{a_0}{2}\right)^{l_1+l_2+l_3+5}\left\{\frac{4}{l_1 l_3}(l_1+l_2+l_3+2)!+\left[\frac{2}{l_1(l_3+1)}+\frac{2}{(l_1+1)l_3}\right](l_1+l_2+l_3+3)!\right.$$
$$\left.+\frac{1}{(l_1+1)(l_3+1)}(l_1+l_2+l_3+4)!\right\}$$

したがって

$$R(1,1,2)=R(2,1,1)=\left(\frac{a_0}{2}\right)^9\cdot 6!\times\frac{39}{2}$$

$$R(1,2,1)=\left(\frac{a_0}{2}\right)^9\cdot 6!\times 32$$

これらの値を使って R^{-7} の係数は

$$-\frac{Z^3e^2}{\pi a_0{}^3}\times\frac{8}{15}\pi\times\left(\frac{a_0}{2}\right)^9\times 6!\times[32+39]=-\frac{213}{4}Z^3e^2a_0{}^6$$

〔注〕 別に必要ではないが，問題Ⅷ-3（注）の結果を使うと $\langle 1|H'|1\rangle$ の一般式が求まる．

$$P_l(\cos\theta)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_{l0}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_{l0}{}^*(\theta,\phi)$$

であることに注意して

$$\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,P_{l_1}(\cos\theta)P_{l_2}(\cos\theta)P_{l_3}(\cos\theta)$$

$$=\sqrt{\frac{4\pi}{2l_1+1}}\sqrt{\frac{4\pi}{2l_2+1}}\sqrt{\frac{4\pi}{2l_3+1}}\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,Y^*_{l_10}(\theta,\phi)Y_{l_20}(\theta,\phi)Y_{l_30}(\theta,\phi)$$

$$=4\pi\left[\frac{1}{\sqrt{2l_1+1}}\langle l_20l_30|l_10l_2l_3\rangle\right]^2$$

証明はしないが Clebush-Gordan 係数の性質から $l=\dfrac{l_1+l_2+l_3}{2}$ とおけば

$l_1+l_2+l_3=$偶数のとき

$$\frac{1}{\sqrt{2l_1+1}}\langle l_20l_30|l_10l_2l_3\rangle=(-1)^{l+l_3-l_2}\sqrt{\frac{(l_1+l_2-l_3)!(l_1-l_2+l_3)!(-l_1+l_2+l_3)!}{(l_1+l_2+l_3+1)!}}$$
$$\times\frac{l!}{(l-l_1)!(l-l_2)!(l-l_3)!}$$

$l_1+l_2+l_3=$奇数のとき零．ただし $|l_2-l_3|\leq l_1\leq l_2+l_3$，この結果から角度積分は当然のことだが l_1, l_2, l_3 について対称になっている．こうして W_3 は

$$\langle 1|H'|1\rangle=-\frac{Z^3e^2}{\pi a_0^3}\sum_{l_1,l_2,l_3}\frac{1}{R^{l_1+l_2+l_3+3}}4\pi\left[\frac{1}{\sqrt{2l_1+1}}\langle l_20l_30|l_10l_2l_3\rangle\right]^2R(l_1l_2l_3)$$

である．

問題VIII-16　［第2版，VII-問18と同一］

調和振動子のすべての状態に対して，WKB 近似は正しいエネルギー固有値を与えることを示せ．

〔解〕 $V(x)=\dfrac{1}{2}Kx^2$ を (34.22) [28.22] に代入すると，

$$2\int_{-\sqrt{2E/K}}^{\sqrt{2E/K}}\left\{2m\left[E-\frac{1}{2}Kx^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}}dx=\left(n+\frac{1}{2}\right)h\qquad n=0,1,2\cdots\cdots$$

これを計算することにより

$$2\pi\sqrt{\frac{m}{K}}E=\left(n+\frac{1}{2}\right)h\qquad n=0,1,2\cdots\cdots$$

を得るので

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{K}{m}}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\qquad n=0,1,2\cdots\cdots$$

ただし $\omega_c=\sqrt{\dfrac{K}{m}}$．これは (13.8) [〃] と完全に同じ結果を与える．

〔注〕 この場合 (34.22) [28.22] は上の式で与えられるが，積分の中は運動量であるからこの積分はまさに作用積分そのものである．(問題IV-1参照)

問題VIII-17 ［第2版，VII-問19と同一］

$x=0$ で $-V_0$ に等しく，かつ $x=\pm a$ で零になるまでは x とともに一次的に変化し，$|x|>a$ に対しては零であるようなポテンシャル中での質量 m の粒子の一次元の運動に，WKB 法を適用せよ． $mV_0a^2/\hbar^2=40$ の場合，この近似法によって得られるすべての結合エネルギーの準位を求めよ．

〔解〕 この場合に (34.22) [28.22] を適用すると

$$2\int_{-a(1+E/V_0)}^{0}\left\{2m\left[E+V_0+\frac{V_0}{a}x\right]\right\}^{\frac{1}{2}}dx+2\int_0^{a(1+E/V_0)}\left\{2m\left[E+V_0-\frac{V_0}{a}x\right]\right\}^{\frac{1}{2}}dx=\left(n+\frac{1}{2}\right)h$$

ただし $-V_0\leq E\leq 0$ である．これより

$$\frac{8}{3}\sqrt{2mV_0a^2}\left(1+\frac{E}{V_0}\right)^{\frac{3}{2}}=\left(n+\frac{1}{2}\right)h$$

または

$$\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}\left(1+\frac{E}{V_0}\right)^{\frac{3}{2}}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$$

$mV_0a^2/\hbar^2=40$ であることおよび

$$0\leq\left(1+\frac{E}{V_0}\right)^{\frac{3}{2}}\leq 1$$

を使って

$$0\leq\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\leq\frac{4}{3}\sqrt{80}$$

が得られるので，許されるエネルギー準位は

$$n=0,1,2,3$$

である．

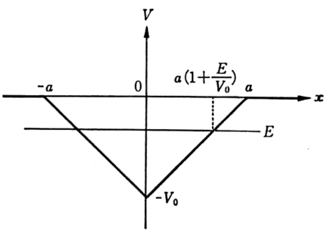


図 16

問題VIII-18 ［第2版，VII-問20と同一］

大きな r に対して r^{-n} のように減少する三次元の引力ポテンシャルは，$n \leqq 2$ の場合，無限に多くの束縛状態をもつことを，WKB 法を用いて示せ．

〔**解**〕 ポテンシャル $V(r)$ による，角運動量 l の束縛状態のエネルギー $-E$ はWKB方法では (34.22) [28.22]

$$2\int_{r_1}^{r_2}\left\{2\mu\left[E-V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\right\}^{\frac{1}{2}} dr=\left(n+\frac{1}{2}\right)h \qquad n=0,1,2\cdots\cdots$$

の解として与えられる．r_1, r_2 は転回点である．S 波の束縛状態については

$$2\int_{r_1}^{r_2}\{2\mu[E-V(r)]\}^{\frac{1}{2}}\,dr=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar, \qquad n=0,1,2,\cdots\cdots$$

となり，左辺の積分の値を，Eを適当にとることにより，いくらでも大きくできればこのポテンシャル $V(r)$ は S 波の束縛状態を無限個もつことになる．

まずある $r_0(>0)$ が存在して

$$V(r)=-\frac{g^2}{r^n},\ r \geq r_0\,(g>0) \qquad (1)$$

の場合を考える．aを1より大きい数として $E=-g^2/(ar_0)^n$ とおくと

$$\begin{aligned}
&2\int_{r_1}^{r_2}\{2\mu[E-V(r)]\}^{\frac{1}{2}} dr\\
&\geq 2\int_{r_0}^{ar_0}\left\{2\mu\left[-\frac{g^2}{(ar_0)^n}+\frac{g^2}{r^n}\right]\right\}^{\frac{1}{2}} dr\\
&=2\sqrt{2\mu}\,g\,r_0{}^{(2-n)/2}\times a^{(2-n)/2}\\
&\qquad\times\int_{1/a}^{1}\left[-1+\frac{1}{x^n}\right]^{\frac{1}{2}} dx \quad (2)
\end{aligned}$$

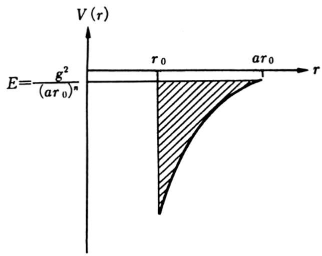


図 17

となり，この積分は $n=2$ のとき，$a\to+\infty$ で発散し $n<2$ のときは収束する．前に因子 $a^{(2-n)/2}$ が存在するから $n\leq 2$ なら

$$\lim_{a\to+\infty} 2\int_{r_1}^{r_2}\left\{2\mu\left[-\frac{q^2}{(ar_0)^n}-V(r)\right]\right\}^{\frac{1}{2}} dr \longrightarrow +\infty$$

となって，$V(r)$ は S 波で無限に沢山の束縛状態を持つことがわかった．一般の場合，つまり（1）の代りに

$$\left|V(r)+\frac{g^2}{r^n}\right|\leq\epsilon(r)\frac{g^2}{r^n},\ \ r\geq r_0\ \ (\epsilon(r)\to 0,\ \ r\to+\infty)$$

のときも $E=-g^2/(ar_0)^n$ とおき，積分を（2）で下からおさえると，$\epsilon(r)=0$ でないため誤差が出るが，その誤差は $a\to+\infty$ とすると積分（2）よりも寄与が小さいことがわかるから，結論は変わらない．

問題Ⅷ-19　[第2版，Ⅷ-問1と同一]

基底状態にある水素原子がコンデンサーの極板の間におかれている．このコンデンサーにあるパルス電圧をかけて，$t<0$ では $\mathsf{E}=0$ で $t>0$ では $\mathsf{E}=\mathsf{E}_0e^{-t/\tau}$ という時間的変化を示す一様な電場がつくられているとする．長い時間をかけた後で，この原子が $2S$ 状態（200）に存在する確率を一次のオーダーで求めよ．この原子が $2P$ 状態のそれぞれに存在する確率はそれに対応してどうなるか．

〔解〕 摂動は

$$H'(t)=\begin{cases}0 & t<0\\ e\mathsf{E}_0e^{-t/\tau}r\cos\theta & t>0\end{cases}$$

最初の状態 $|m\rangle$ として $|n,l,m\rangle=|1,0,0\rangle$（$1S$ 状態）をとる．遷移後の状態 $|k\rangle$ として $2S$ 状態 $|2,0,0\rangle$ をとると，$H'(t)$ の中の角部分が $\cos\theta$ であるから問題3と同じ議論によって

$$\langle 2,0,0|H'(t)|1,0,0\rangle=0$$

となることがわかる．したがって摂動一次では $1S\to 2S$ の遷移は起こらない．

$|k\rangle$ として $2P$ 状態 $|2,1,m\rangle$（$m=0,\pm1$）をとると同じ議論から

$$\langle 2,1,\pm1|H'(t)|1,0,0\rangle=0$$

であるから，摂動第一次で起こりうる遷移は $|1,0,0\rangle\to|2,1,0\rangle$ のみである．したがって（35.9）[28.9] により

$$a(t)\equiv a^{(1)}{}_{|100\rangle\to|2,1,0\rangle}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\langle 2,1,0|H'(t')|1,0,0\rangle e^{i\omega_{km}t'}dt'$$

を計算すればよい．ところで

$$\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi Y_{10}{}^*(\theta,\phi)\cos\theta Y_{00}(\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\int_0^\infty r^2 dr\, R_{21}(r) r R_{10}(r) = \frac{1}{a_0{}^4} 2 \cdot \frac{1}{2\sqrt{6}} \int_0^\infty r^2 dr e^{-r/a_0} r \cdot r e^{-r/2a_0} = \frac{2^8}{3^4\sqrt{6}} a_0$$

であるから

$$\langle 2,1,0|H'(t')|1,0,0\rangle = \begin{cases} 0 & t'<0 \\ \dfrac{2^7\sqrt{2}}{3^5} a_0 e \mathrm{E}_0 e^{-t'/\tau} & t'>0 \end{cases}$$

これと

$$\omega_{km} = \frac{1}{\hbar}(E_2 - E_1) = \frac{1}{\hbar}\left(-\frac{\mu e^4}{8\hbar^2} - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\right) = \frac{3\mu e^4}{8\hbar^3}$$

より

$$a(\infty) = \frac{2^7\sqrt{2}}{3^5} a_0\, e \mathrm{E}_0 \frac{\tau}{\hbar\omega_{km}\tau + i\hbar} = \frac{2^7\sqrt{2}}{3^5} a_0\, e\mathrm{E}_0 \frac{8\hbar^2\tau}{3\mu e^4\tau + i8\hbar^3}$$

したがって

$$|a(\infty)|^2 = \frac{2^{15}}{3^{10}} a_0{}^2\, e^2 \mathrm{E}_0{}^2 \frac{64\hbar^2\tau^2}{9\mu^2 e^8\tau^2 + 64\hbar^6}$$

問題Ⅷ-20 ［第2版，Ⅷ-問2に対応］

(35.20) を利用して，エネルギー $\hbar\omega$ の光子による水素原子の光電離に対する全断面積を計算せよ．光子のエネルギーが閾値をあまり上回らない限り，光子の波長は原子の大きさに比べて大きくなっており，その結果 (35.20) を導く際に採用した一様電場の仮定は光電離の問題に対しては適切なものであることを示せ．なお，光波の磁場の効果は電場の効果に比べて無視しうることも示せ．

〔**解**〕 エネルギー $\hbar\omega$ の光子が，基底状態の水素原子をイオン化して，エネルギー $\hbar^2k^2/2\mu$ の電子を放出させるときには，エネルギー保存則から

$$\hbar^2k^2/2\mu = -\mu e^4/2\hbar^2 + \hbar\omega$$

が成り立たねばならない．イオン化が起こるための最低のエネルギー（閾値）は $k=0$ として，$\hbar\omega = \mu e^4/2\hbar^2$ である．したがって題意からこの場合 $\hbar\omega \approx \mu e^4/2\hbar^2$ としてよいので，この光子の波長 λ は

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} \approx \frac{2\pi c \cdot 2\hbar^3}{\mu e^4} = 4\pi \times \frac{c\hbar}{e^2} \times a_0 = 4\pi \times 137 \times a_0 \approx 1700 a_0$$

で与えられるが，これは水素原子の半径 a_0 にくらべて相当に大きい．この原子の付近での光子を平面電磁波で記述し，ベクトルポテンシャルを

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=2\boldsymbol{A}_0\cos(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t),\qquad |\boldsymbol{k}'|=k'=\omega/c$$

で与えれば，これから電場，磁場は

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=-\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}=-2k'\boldsymbol{A}_0\sin(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$$

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{rot}\boldsymbol{A}=-2(\boldsymbol{k}'\times\boldsymbol{A}_0)\sin(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$$

となる．この電磁波に伴うエネルギーの流れは，ポインティングベクトルが

$$\frac{c}{4\pi}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})=\frac{\omega}{\pi}\boldsymbol{A}_0{}^2\cdot\boldsymbol{k}'\sin^2(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$$

となるので，これを一周期 $T_0=\dfrac{2\pi}{\omega}$ での時間平均をとることによって

$$\frac{\omega^2}{2\pi c}\boldsymbol{A}_0{}^2\cdot\frac{\boldsymbol{k}'}{k'}$$

となる．これから $\boldsymbol{k}'$ に垂直な面に単位面積，単位時間当りやってくる入射エネルギーの強度は $\dfrac{\omega^2}{2\pi c}\boldsymbol{A}_0{}^2$ となるが，これを光子の個数に直すには $\hbar\omega$ で割ればよいので，結局入射フラックスは

$$\frac{\omega}{2\pi\hbar c}\boldsymbol{A}_0{}^2$$

で与えられる．

さて，まず磁場の方は無視して電場の効果を考えると，上に述べたように原子の大きさにくらべて光の波長が十分に大きいので，この原子の付近では電場は一様とみなしてよい．したがって $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ で，$\boldsymbol{r}$ に依存する部分を無視すれば

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)\simeq\boldsymbol{E}(t)=2k'\boldsymbol{A}_0\sin\omega t$$

$\boldsymbol{A}_0$ の方向を z 軸にとれば，その大きさは

$$E(t)=2k'A_0\sin\omega t$$

となるが，これは（35.15）で $E_0\to k'A_0$ と置き換えたものなので，本文と同じ議論が使えて，単位時間当りの遷移確率は（35.20）で $E_0\to k'A_0=\omega A_0/c$ とおけば

$$dw=\frac{256\mu k^3e^2\omega^2A_0{}^2a_0{}^7}{\pi\hbar^3c^2(1+k^2a_0{}^2)^6}\cos^2\theta\sin\theta d\theta d\phi$$

微分断面積は，単位面積，単位時間当り光子が1個の割合で入射するときの遷移確率に直せばよいので dw を入射フラックスで割って

$$\sigma(\theta\phi)\sin\theta d\theta d\phi=\frac{2\pi\hbar c}{\omega A_0{}^2}dw=\frac{512\mu k^3e^2\omega a_0{}^7}{\hbar^2c(1+k^2a_0)^6}\cos^2\theta\sin\theta d\theta d\phi$$

したがって全断面積は

$$\sigma=\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\sigma(\theta,\phi)=\frac{2048\pi\mu k^3e^2\omega a_0{}^7}{3c\hbar^2(1+k^2a_0{}^2)^6}$$

さて磁場の効果をみつもってみよう．磁場と水素原子の電子との相互作用として（31.24）を採用すると

$$H'=\frac{e}{2\mu c}\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{L},\ \ \boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$$

$|\boldsymbol{H}|\sim2k'A_0\sin\omega t$，$|\boldsymbol{L}|$ は角運動量の大きさだから $\hbar$ の程度と考えてよい，実際問題Ⅳ-13の結果より

$$\langle T\rangle=\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle=\frac{e^2}{2a_0}$$

なので

$$|\boldsymbol{L}|\sim|\boldsymbol{r}|\cdot|\boldsymbol{p}|\sim a_0\sqrt{\frac{\mu e^2}{a_0}}=\sqrt{a_0\mu e^2}=\hbar$$

したがって磁場の相互作用は

$$\left|\frac{e}{2\mu c}\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{L}\right|\sim2k'A_0\frac{e}{2\mu c}\hbar\sin\omega t$$

の程度の大きさ，一方電場の相互作用は

$$|eEz|\sim2k'A_0ea_0\sin\omega t$$

の程度，これよりこの比は

$$\frac{\hbar}{2\mu ca_0}\sim\frac{e^2}{2\hbar c}=\frac{1}{2\times137}$$

となり，相当小さいので磁場の効果は無視できる．

問題Ⅷ-21 ［第2版，Ⅷ-問7に対応］

（35.32）［31.16］式が H_0 と H_1 とを対称的な形に含んでいない理由を説明せよ．なお，H_i が t を含むが，ただしそれが一次のオーダーだけであるという場合には，H_it_0 を $\int_0^{t_0}H_i(t)dt$ で置き換えることができることを証明せよ．

〔**解**〕（35.32）［31.16］で H_0 と H_1 とが対称的にでてこないのは，中間のハミルト

ニアン H_i を作用させた時刻を，時刻を測る原点 $t=0$ と一致させたためとみられる．そこで時刻 t の原点をずらせて，H_i の作用している時間を $t_1<t<t_0$ とする．すると

$$\psi=\mathrm{S}_n a_n u_n e^{-iE_nt/\hbar} \qquad t<t_1$$

$$\psi=\mathrm{S}_k c_k w_k e^{-iE_kt/\hbar} \qquad t_1<t<t_0$$

$$\psi=\mathrm{S}_\mu b_\mu v_\mu e^{-iE_\mu t/\hbar} \qquad t_0<t$$

となり，$t=t_1$ での連続性から

$$c_k=\mathrm{S}_n a_n\langle k|n\rangle e^{-i(E_n-E_k)t_1/\hbar}$$

$t=t_0$ での連続性から

$$b_\mu=\mathrm{S}_k c_k\langle\mu|k\rangle e^{-i(E_k-E_\mu)t_0/\hbar}$$

となるので

$$b_\mu=\mathrm{S}_n a_n\mathrm{S}_k\langle\mu|k\rangle e^{-i\{E_nt_1-E_\mu t_0+E_k(t_0-t_1)\}/\hbar}\langle k|n\rangle$$

が得られるが，指数関数の肩が十分小さければ，(35.32) [31.16]を得たのと同様にして

$$b_\mu\approx\mathrm{S}_n a_n\left\langle\mu\middle|\left[1-\frac{i}{\hbar}\{H_0t_1-H_1t_0+H_i(t_0-t_1)\}\right]\middle|n\right\rangle$$

ここで時刻の原点を $t_1=-t_0$ となるように (t_1 と t_0 の中点を原点となるように) とると

$$b_\mu\approx\mathrm{S}_n a_n\left\langle\mu\middle|\left[1-\frac{it_0}{\hbar}(2H_i-H_0-H_1)\right]\middle|n\right\rangle$$

となり，H_0 と H_1 は対称的に表われる．

次に $0<t<t_0$ でのハミルトニアンが時間に依存し $H_i(t)$ で与えられる場合を考える．$0<t<t_0$ での Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=H_i(t)\psi(t) \qquad 0<t<t_0$$

となる．$\psi(0)$ は $t=0$ での連続性により

$$\psi(0)=\mathrm{S}_n a_n u_n$$

で与えられる．上の方程式は積分方程式

$$\psi(t)=\psi(0)+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'H_i(t')\psi(t') \qquad 0<t<t_0$$

と同等であり，これを二度使うと

$$\psi(t)=\left[1+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'H_i(t')\right]\psi(0)+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt'H_i(t')\left[\int_0^{t'}dt''H_i(t'')\psi(t'')\right]$$
$$0<t<t_0$$

となる．$t=t_0$ での連続性より

$$S_\mu b_\mu v_\mu e^{-iE_\mu t_0/\hbar}=S_n a_n\left[1+\frac{1}{i\hbar}\int_0^{t_0}dt\,H_i(t)\right]u_n+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^{t_0}dtH_i(t)\times\left[\int_0^t dt'H_i(t')\psi(t')\right]$$

が得られる．右辺第二項は

$$\lim_{t_0\to 0}\frac{1}{{t_0}^2}\int_0^{t_0}dtH_i(t)\left[\int_0^t dt'H_i(t')\psi(t')\right]=H_i{}^2(0)\psi(0)$$

だから ${t_0}^2$ の程度の大きさであるから無視すると，

$$\begin{aligned}b_\mu&\approx S_n a_n\left\langle\mu\left|\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_0^{t_0}dt'H_i(t')\right]e^{iE_\mu t_0/\hbar}\right|n\right\rangle\\&\approx S_n a_n\left\langle\mu\left|\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_0^{t_0}dtH_i(t)+\frac{it_0}{\hbar}H_1\right]\right|n\right\rangle\end{aligned}$$

となり（35.32）[31.16] で t_0H_i を $\int_0^{t_0}dtH_i(t)$ で置き換えたものになっている．

問題VIII-22 ［第２版，VIII-問６に対応］

断熱近似における n 番目の状態の励起についての（35.33）のすぐ次の注意が正しいことを証明せよ．

〔**解**〕 量子数 n の状態の古典論での最高速度 v_{max} は

$$\frac{1}{2}mv^2{}_{max}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

より

$$v_{max}=\left[\frac{(2n+1)\hbar\omega_c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}$$

また $\dfrac{\partial H}{\partial t}$ の零でない行列要素は，$\dfrac{\partial H}{\partial t}=-K(x-a)\dot{a}$ と（13.18）[〃] から

$$\left\langle n+1\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|n\right\rangle=-\frac{K\dot{a}}{\alpha}\left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\left\langle n-1\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|n\right\rangle=-\frac{K\dot{a}}{\alpha}\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

これから（35.27）[31.9] の大きさは

$$\left|(\hbar\omega^2{}_{n+1,n})^{-1}\left\langle n+1\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|n\right\rangle\right|=\sqrt{\frac{(n+1)m}{2\hbar\omega_c}}\dot{a}=\sqrt{\frac{(2n+1)(n+1)}{2}}\,\frac{\dot{a}}{v_{max}}$$

$$\left|(\hbar\omega^2{}_{n-1,n})^{-1}\left\langle n-1\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|n\right\rangle\right|=\sqrt{\frac{nm}{2\hbar\omega_c}}\dot{a}=\sqrt{\frac{n(2n+1)}{2}}\frac{\dot{a}}{v_{max}}$$

右辺は n の大きいところでいずれも

$$\frac{\dot{a}}{v_{max}/n}$$

となるので，$\dot{a}\ll v_{max}/n$ なら（35.27）[31.9] の大きさは1に比べて小さくなるので断熱近似が使えることになる．

問題Ⅷ-23　［第3版］

瞬間近似の妥当性について，（35.34）式の次で述べた注意が正しいことを証明せよ．

〔**解**〕（35.34）は A_n を与える（13.21）[13.21] と同じなので（13.22）[13.22] を出したと同じようにして

$$\frac{(-\alpha a)^n e^{-\frac{1}{4}\alpha^2 a^2}}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}}}$$

となる．n が大きいときこの式の絶対値を最大にする n は（13.23）[13.23] を求めたと同じようにして

$$n_0\approx\frac{(\alpha a)^2}{2}=\frac{Ka^2}{2\hbar\omega_c}$$

となるので，この量子数に対応する，調和振動子のエネルギーは

$$E_{n_0}=\left(n_0+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\approx n_0\hbar\omega_c=\frac{Ka^2}{2}$$

であるが，これは振巾 a の調和振動子の古典論でのエネルギーに等しい．

また $t_0\ll 1$ と考えられるので $H_i=H_0$ とすると，（35.32）[13.16] で t_0 のかかった項の大きさは

$$\left|\left\langle\mu=0\left|\frac{it_0}{\hbar}(H_0-H_1)\right|n=n_0\right\rangle\right|$$

$$=\left|\left\langle\mu=0\left|\frac{it_0}{\hbar}(E_0-E_{n_0})\right|n=n_0\right\rangle\right|$$

$$=\frac{t_0}{\hbar}n_0\hbar\omega_c\left|\langle\mu=0\,|\,n=n_0\rangle\right|$$

となるので

$$t_0 n_0 \omega_c \ll 1$$

なら瞬間近似がよいと考えられる．ところで古典論では調和振動子の周期は $T_0=2\pi/\omega_c$ だから上の条件は

$$t_0 \ll T_0/n_0$$

となる．

問題VIII-24 ［第2版，VIII-問8と同一］

質量3の水素原子核は放射性で，最大エネルギーが約 17,000 ev の1個の電子の放出を伴って，質量3のヘリウム核に変化する．最初水素原子中に存在する核外電子に対して瞬間近似が適用できること，また利用しうる他の近似法に対してこの近似法が優れていることを示せ．なお，最初水素原子が 1S 状態にあったとした場合，最後のヘリウムイオンが 1S，2S および 2P の各状態に見出される確率の数値を計算せよ．さらに，この過程におけるエネルギーのバランスについて定性的な議論を行なえ．

〔**解**〕 電子は $t<0$ で H^3 の回りを廻っていたのが，$t>0$ では He^{3+} に束縛された状態にうつる．陽子，中性子の質量は電子に比べて十分大きい（$m_p/m_e \sim 2000$）ので換算質量は m_e としてよい．ハミルトニアンは

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2-\frac{e^2}{r} \qquad (t<0)$$

$$H_1=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2-\frac{2e^2}{r} \qquad (t>0)$$

である．エネルギーは $t<0$ では 1S 状態であるから $E_0=-\frac{e^2}{2a_0}$，$t>0$ では 1S 状態に対しては $-\frac{2e^2}{a_0}$，2S，2P 状態に対しては $-\frac{e^2}{2a_0}$ である．さて瞬間近似が適用できるためには (35.32) [31.16] で

$$\left|\frac{E_\kappa-E_\mu}{\hbar}t_0\right| \ll 1$$

が成り立たねばならないが，t_0 は H^3 の原子核から放出された電子が，この原子の半径 $\left(a_0=\frac{\hbar^2}{m_e e^2}\right)$ を通過する時間の程度であるから，

$$t_0 \sim \frac{a_0}{v}$$

ところで $\frac{1}{2}m_e v^2{}_{max}=17,000\,\text{ev}$ および $m_e c^2=5.11\times10^5\,\text{ev}$ より

$$v_{max}\sim 0.26\times c$$

ただし c は光速度である.

ところで (35.32) [31.16] にあらわれる中間のハミルトニアン H_i は, 原子に束縛されている電子と原子核, およびこの電子と飛び出してゆく電子との相互作用によるものであり, これらがおよそ a_0 の距離で相互作用しているので E_κ は

$$-\frac{2e^2}{a_0}+\frac{e^2}{a_0}=-\frac{e^2}{a_0}$$

の程度の大きさであるから

$$|E_\kappa-E_\mu|\sim\frac{e^2}{a_0}$$

の程度となる. したがって

$$\left|\frac{E_\kappa-E_\mu}{\hbar}t_0\right|\sim\frac{e^2}{\hbar a_0}\frac{a_0}{0.26\times c}\sim\frac{1}{0.26\times137}\sim\frac{1}{36}$$

が得られるが, これは1に比べ小さいとみてよいので瞬間近似が使えるとみてよい.

H^3 の 1S 状態の波動関数 u_{100} は

$$u_{100}(r)=R_{10}Y_{00}=\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\cdot 2e^{-r/a_0}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

であり, He^{3+} の 1S, 2S, 2P 状態の波動関数 $v_{100}, v_{200}, v_{21m}$ はそれぞれ

$$v_{100}(r)=R_{10}'Y_{00}=\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\cdot 2\cdot e^{-2r/a_0}\cdot\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$v_{200}(r)=R_{20}'Y_{00}=\left(\frac{2}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{2r}{a_0}\right)e^{-2r/2a_0}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$v_{21m}(r)=R_{21}'Y_{1m}=\left(\frac{2}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{2r}{a_0\sqrt{3}}e^{-2r/2a_0}Y_{1m}(\theta,\phi)\qquad m=0,\pm1$$

である. 1S 状態からの遷移の確率振幅はそれぞれ

$1S\to1S$; $b_{100}=(v_{100}, u_{100})$

$1S\to2S$; $b_{200}=(v_{200}, u_{100})$

$1S\to2P$; $b_{21m}=(v_{21m}, u_{100})$

で求まる. したがって

$$b_{100}=\int R_{10}'Y_{00}{}^*R_{10}Y_{00}d^3r=\int_0^\infty r^2dr\,R_{10}'R_{10}\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,Y_{00}{}^*Y_{00}$$

$$=\int_0^\infty r^2 dr R_{10}'R_{10}=2^{\frac{7}{2}}\frac{1}{a_0{}^3}\int_0^\infty e^{-(3/a_0)r}r^2 dr$$

$$=\frac{16}{27}\sqrt{2}$$

同様に

$$b_{200}=-\frac{1}{2}$$

b_{21m} は角部分の積分を考えると，零になることがわかるので $1S\to 2P$ 遷移は起こらない．これは角運動量の保存を意味している．

以上から結局

$$|b_{100}|^2=0.70,\quad |b_{200}|^2=0.25,\quad |b_{21m}|^2=0$$

が得られる．

ここでは原子核を静止しているとし，原子に束縛された電子についてのみハミルトニアンを考えている．しかし $t=0$ から最後定常状態に落ちつくまでの過程でのエネルギーの出入りは，原子核内の中性子が陽子に変わることにより，その質量の差 1.29 Mev のエネルギーが放出されるはずであるし，電子が飛び出すことによる原子核の反跳，および定常状態に落ちつくまでに原子核と束縛された電子との相互作用の効果も考えねばならぬことになる．しかしいまの場合 $H_0\to H_1$ へ変化する時間 $\Delta t=t_0$ は相当小さく，一方この問題で考えているエネルギー変化は e^2/a_0 の程度であるから， $\Delta E\Delta t\sim\hbar$ で定まる ΔE の巾の中に含まれてしまうので，いまの枠内でこれを取り扱うことはできない．

【追　加】

※(17pより)

方程式(2)は

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi(\mathbf{r},t)=0$$

と因数分解されるから，その解は一般に

$$\psi(\mathbf{r},t)=\psi_1(\mathbf{r},t)+\psi_2(\mathbf{r},t),$$

ただし

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi_1(\mathbf{r},t)=0,$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi_2(\mathbf{r},t)=0$$

とあらわせる．$\psi_1(\mathbf{r},t)$ は通常の Schrödinger 方程式の自由粒子の解であるが，$\psi_2(\mathbf{r},t)$ は時間（あるいは運動方向）を逆転した方程式の解となっている．したがって(2)の解は通常の自由粒子の解と，その運動方向を逆転した解の重ね合わせであり，重ね合わせの重みは初期値 $\psi(\mathbf{r},0)$ だけからは定まらず $\psi_t(\mathbf{r},0)$ も与えてはじめて定まる．

※（18pより）

〔**注意**〕

(4)で $C=1$ とおいた関数を $g(x,t;v)$ とおく：

$$g(x,t;v)=\exp\left[\frac{-i}{\hbar}\left(mvx-\frac{(mv)^2}{2m}t\right)\right].$$

容易に確かめられるごとく この g は

$$g(x-v_1t,t;v_2)\cdot g(x,t;v_1)=g(x,t;v_1+v_2)$$

を満たす．これは群論的に意味づけられる．

空間が一次元のガリレイ変換は速度 v をパラメーターに持つ（可換）群をなす：

$$G(v):(x,t)\to(x',t')=(x-vt,t)$$

とおくと

$$G(0)=\mathbf{1}\ （恒等変換）,$$

$$G(v_2)\cdot G(v_1)=G(v_1+v_2).$$

上の問で得られた結果は

$$G(v_1) : \psi(x, t) \to \psi'(x', t') = g(x, t\ ;\ v_1)\psi(x, t)$$

$$x' = x - v_1 t,\ t' = t$$

と書くことができる．$G(v_1)$ で変換された ψ' にさらに $G(v_2)$ をほどこすと

$$G(v_2) : \psi'(x', t') \to \psi''(x'', t'') = g(x', t'\ ;\ v_2)\psi'(x', t')$$

$$x'' = x' - v_2 t' = x - (v_1 + v_2)t,\ t'' = t' = t$$

となる．一方もとの ψ に $G(v_2)\cdot G(v_1) = G(v_1 + v_2)$ をほどこすと

$$G(v_1 + v_2) : \psi(x, t) \to g(x, t\ ;\ v_1 + v_2)\psi(x, t)$$

となり，両者の ψ に対する効果を等しいとおくと

$$g(x', t'\ ;\ v_2)\psi'(x', t') = g(x, t\ ;\ v_1 + v_2)\psi(x, t)$$

つまり

$$g(x - v_1 t, t\ ;\ v_2)g(x, t\ ;\ v_1)\psi(x, t) = g(x, t\ ;\ v_1 + v_2)\psi(x, t)$$

となり，上の g に関する等式が得られる．このことはガリレイ群を波動関数の空間で表現していることを意味する．（$C=1$ としたのは $v=0$ のとき $g(x, t\ ;\ 0) \equiv 1$，つまりガリレイ群の恒等変換 $G(0)=1$ を波動関数の恒等変換に対応させるためである．）

第 IX 章

衝突の理論における近似法

問題 IX-1　［第 3 版］

ψ の任意性を用いて（36.8）の 4 個の方程式を任意の時刻において導け．

〔**解**〕（36.5）より $t_1>t$ に対し

$$\psi(\mathbf{r}_1,t_1)=i\int G^+(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r, \tag{1}$$

$t'>t_1$ に対し

$$\psi(\mathbf{r}',t')=i\int G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)\psi(\mathbf{r}_1,t_1)d^3r_1, \tag{2}$$

また $t'>t$ に対し

$$\psi(\mathbf{r}',t')=i\int G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r \tag{3}$$

が成り立つ．（1）を（2）に代入して

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}',t')&=i\int G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)\left\{i\int G^+(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r\right\}d^3r_1\\&=i\int\left\{i\int G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)G^+(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)d^3r_1\right\}\psi(\mathbf{r},t)d^3r\end{aligned}$$

を得るから（3）と比較して

$$G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)=i\int G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)G^+(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)d^3r_1$$

が導かれる．これが（36.8）の第一式である．また第二式については（36.7）を用いれば全く同様にして導かれる．

次に $t>t_1$ に対し（36.5）より

$$\psi(\mathbf{r}',t)=i\int G^+(\mathbf{r}',t\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)\psi(\mathbf{r}_1,t_1)d^3r_1, \tag{4}$$

また（36.7）より

$$\psi(\mathbf{r}_1,t_1)=-i\int G^-(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r \tag{5}$$

が成り立つから（5）を（4）に代入して

$$\psi(\mathbf{r}',t)=i\int G^+(\mathbf{r}',t\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)\left\{-i\int G^-(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r\right\}d^3r_1$$

$$=\int\left\{\int G^+(\mathbf{r}',t\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)G^-(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)d^3r_1\right\}\psi(\mathbf{r},t)d^3r$$

を得る．時刻 t における波動関数 ψ は任意に選べるから

$$\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})=\int G^+(\mathbf{r}',t\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)G^-(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)d^3r_1$$

が導かれる．これが（36.8）の第三式である．第四式は（4）を（5）に代入すれば得られる．

問題Ⅸ-2　［第3版］

G_0 に対する（36.9）式を利用して，（36.8）の最初の方程式が $G_0{}^+$ に対して成立することを直接証明せよ．

〔解〕 $G_0{}^+$ は（36.9），（36.10）より $t'>t_1>t$ に対し

$$G_0{}^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)=-i\left[\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t'-t_1)}\right]^{\frac{3}{2}}\exp\frac{i\mu|\mathbf{r}'-\mathbf{r}_1|^2}{2\hbar(t'-t_1)},$$

$$G_0{}^+(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)\ =-i\left[\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t_1-t)}\right]^{\frac{3}{2}}\exp\frac{i\mu|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}|^2}{2\hbar(t_1-t)}$$

で与えられる．これより

$$i\int G_0{}^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)G_0{}^+(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)d^3r_1=-i\left[\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t'-t_1)}\right]^{\frac{3}{2}}\left[\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t_1-t)}\right]^{\frac{3}{2}}$$

$$\times\int\exp\left[\frac{i\mu|\mathbf{r}'-\mathbf{r}_1|^2}{2\hbar(t'-t_1)}+\frac{i\mu|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}|^2}{2\hbar(t_1-t)}\right]d^3r_1 \qquad (1)$$

となり被積分関数は

$$\frac{i\mu}{2\hbar}\left[\frac{\mathbf{r}'^2-2\mathbf{r}'\cdot\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_1{}^2}{t'-t_1}+\frac{\mathbf{r}_1{}^2-2\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{r}+\mathbf{r}^2}{t_1-t}\right]$$

$$=\frac{i\mu}{2\hbar}\frac{t'-t}{(t'-t_1)(t_1-t)}\left[\mathbf{r}_1{}^2-2\frac{1}{t'-t}((t_1-t)\mathbf{r}'+(t'-t_1)\mathbf{r})\cdot\mathbf{r}_1\right.$$

$$\left.+\frac{1}{t'-t}((t_1-t)\mathbf{r}'^2+(t'-t_1)\mathbf{r}^2)\right]$$

$$=\frac{i\mu}{2\hbar}\frac{t'-t}{(t'-t_1)(t_1-t)}\left[\left|\mathbf{r}_1-\frac{1}{t'-t}((t_1-t)\mathbf{r}'+(t'-t_1)\mathbf{r})\right|^2\right.$$

$$+\frac{(t'-t_1)(t_1-t)}{(t'-t)^2}|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^2\Big]$$

と変形されるから積分変数を $\mathbf{r}_1$ から

$$\mathbf{r}_1'=\mathbf{r}_1-\frac{1}{t_1-t}((t_1-t)\mathbf{r}'+(t'-t_1)\mathbf{r})$$

に変数変換すると（1）の右辺は

$$-i\left[\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t'-t_1)}\right]^{\frac{3}{2}}\left[\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t_1-t)}\right]^{\frac{3}{2}}\exp\left[\frac{i\mu|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^2}{2\hbar(t'-t)}\right]$$
$$\times\int\exp\left[\frac{i\mu(t'-t)}{2\hbar(t'-t_1)(t_1-t)}\mathbf{r}_1'^2\right]d^3r_1' \qquad (2)$$

となる．問題Ⅲ-8 の〔注２〕の（11）式を用いると

$$\int\exp\left[\frac{i\mu(t'-t)}{2\hbar(t'-t_1)(t_1-t)}\mathbf{r}_1'^2\right]d^3r_1'=\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{i\mu(t'-t)}{2\hbar(t'-t_1)(t_1-t)}x^2\right]dx\right\}^3$$
$$=\left[\frac{2\pi i\hbar(t'-t_1)(t_1-t)}{\mu(t'-t)}\right]^{\frac{3}{2}}$$

を得る．したがって（2）は

$$-i\left[\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t'-t)}\right]^{\frac{3}{2}}\exp\frac{i\mu|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^2}{2\hbar(t'-t)}$$

となりこれは (36.9), (36.10) より $t'>t$ のときの $G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$ に等しい．

問題Ⅸ-3　［第３版］

ハミルトニアンがエルミチアンであるならば時間を含む Schrödinger 方程式の任意の二つの解の内積は時間について一定であることを証明せよ．この結果を利用して，任意の二つの解の直交性が時間について保持されることをまず証明し，次いで（(36.32) におけるように $t'>T_2$ の時刻 t_2 でとか (36.38) におけるように $t<-T_1$ の時刻 t_1 でとかでなく）任意の時刻に評価することのできるある内積の形での $<\beta|S|\alpha>$ に対する表式を求めよ．

〔**解**〕 ハミルトニアンがエルミチアンであれば (36.22)：

$$G^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)=G^{-*}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') \qquad (1)$$

が成り立つ．時間を含む Schrödinger 方程式 (36.1) の任意の二つの解 ψ_1,ψ_2 を (36.2) のごとく

$$\psi_1(\mathbf{r}',t')=i\int G(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)\psi_1(\mathbf{r}_1,t)d^3r_1,$$

$$\psi_2(\mathbf{r}',t')=i\int G(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)\psi_2(\mathbf{r}_2,t)d^3r_2$$

とあらわす．この二つの解の内積は

$$\begin{aligned}(\psi_1,\psi_2)(t')&\equiv\int\psi_1{}^*(\mathbf{r}',t')\psi_2(\mathbf{r}',t')d^3r'\\&=\int\left\{-i\int G^*(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)\psi_1{}^*(\mathbf{r}_1,t)d^3r_1\right\}\\&\qquad\qquad\times\left\{i\int G(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)\psi_2(\mathbf{r}_2,t)d^3r_2\right\}d^3r'\\&=\iint\left\{\int G^*(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)G(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)d^3r'\right\}\psi_1{}^*(\mathbf{r}_1,t)\psi_2(\mathbf{r}_2,t)d^3r_1d^3r_2\end{aligned}$$

で与えられる．$t'>t$ なら（1）および（36.3）より

$$G^*(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)=G^{+*}(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)=G^-(\mathbf{r}_1,t\,;\,\mathbf{r}',t'),$$
$$G(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)=G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)$$

となり（36.8）の第四式より

$$\begin{aligned}&\int G^*(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)G(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)d^3r'\\&\qquad=\int G^-(\mathbf{r}_1,t\,;\,\mathbf{r}',t')G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)d^3r'=\delta^3(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\end{aligned}$$

を得る．また $t'<t$ なら（1）および（36.6）より

$$G^*(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)=-G^{-*}(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)=-G^+(\mathbf{r}_1,t\,;\,\mathbf{r}',t'),$$
$$G(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)=-G^-(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)$$

となり（36.8）の第三式を用いて

$$\begin{aligned}&\int G^*(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_1,t)G(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)d^3r'\\&\qquad=\int G^+(\mathbf{r}_1,t\,;\,\mathbf{r}',t')G^-(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_2,t)d^3r'=\delta^3(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\end{aligned}$$

を得る．したがっていずれの場合にも

$$\begin{aligned}(\psi_1,\psi_2)(t')&=\iint\delta^3(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\psi_1{}^*(\mathbf{r}_1,t)\psi_2(\mathbf{r}_2,t)d^3r_1d^3r_2\\&=\int\psi_1{}^*(\mathbf{r},t)\psi_2(\mathbf{r},t)d^3r\equiv(\psi_1,\psi_2)(t)\end{aligned}$$

となり内積 (ψ_1,ψ_2) は時間に依らないことがわかる．したがって特にある時刻 t で二つの解 ψ_1,ψ_2 が直交しておれば，つまり $(\psi_1,\psi_2)(t)=0$ ならば，任意の時刻 t' で $(\psi_1,\psi_2)(t')=(\psi_1,\psi_2)(t)=0$ であるから時刻 t' においても ψ_1,ψ_2 は直交している．

次に散乱行列 $\langle\beta|S|\alpha\rangle$ は相互作用が時刻 $-T_1$ から起こりはじめ T_2 に終るものとすると (36.32) により

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=(\phi_\beta,\psi_\alpha{}^+)(t'),\qquad t'>T_2 \tag{2}$$

または (36.38) により

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=(\psi_\beta{}^-,\phi_\alpha)(t),\qquad t<-T_1 \tag{3}$$

で与えられる．ところが $\psi_\alpha{}^+$ は $t<-T_1$ では ϕ_α に一致する Schrödinger 方程式 (36.1) の解であり，$\psi_\beta{}^-$ は $t'>T_2$ では ϕ_β に一致する解である．したがって任意の二つの解の内積が時間について一定であることを用いると相互作用の起こっている時間 $T_2>t_0>-T_1$ では

$$(\phi_\beta,\psi_\alpha{}^+)(t')=(\psi_\beta{}^-,\psi_\alpha{}^+)(t_0)=(\psi_\beta{}^-,\phi_\alpha)(t)$$

となる．ゆえに

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=(\psi_\beta{}^-,\psi_\alpha{}^+) \tag{4}$$

と定義すれば右辺の内積は任意の時刻でその値を求めてもよい．そして特に時刻が T_2 以後なら (2) に一致し，$-T_1$ 以前なら (3) に一致する．

〔**注意**〕 (4) は直接導くこともできる．散乱行列は (36.33) により

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=i\iint\phi_\beta{}^*(\mathbf{r}',t')G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)\phi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r'd^3r,\qquad t<-T_1,t'>T_2$$

で与えられているが $T_2>t_0>-T_1$ に対しては (36.8) の第一式と (1) より

$$G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)=i\int G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_0,t_0)G^+(\mathbf{r}_0,t_0\,;\,\mathbf{r},t)d^3r_0$$

$$=i\int G^{-*}(\mathbf{r}_0,t_0\,;\,\mathbf{r}',t')G^+(\mathbf{r}_0,t_0\,;\,\mathbf{r},t)d^3r_0$$

となるからこれを上式に代入して

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=\int\left\{-i\int G^-(\mathbf{r}_0,t_0\,;\,\mathbf{r}',t')\phi_\beta(\mathbf{r}',t')d^3r'\right\}^*$$

$$\times\left\{i\int G^+(\mathbf{r}_0,t_0\,;\,\mathbf{r},t)\phi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r\right\}d^3r_0$$

を得る．ここで $\psi_\alpha{}^+$ と $\psi_\beta{}^-$ の定義式 (36.31) と (36.37) を用いると

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=\int\psi_\beta^{-*}(\mathbf{r}_0,t_0)\psi_\alpha^{+}(\mathbf{r}_0,t_0)d^3r_0=(\psi_\beta^{-},\psi_\alpha^{+})(t_0)$$

となる.

問題IX-4　［第3版］

（35.9）［29.8］式と（36.35）式の右辺の第二項との間にどのような関連があるかを示せ.

〔**解**〕 時間を含む Schrödinger 方程式（36.1）において H_0 を摂動を受けていないハミルトニアンと見なし $V(\mathbf{r},t)$ を時間に依存する摂動と見なす．そして

$$V(\mathbf{r},t)=0,\quad t>T_2\quad \text{または}\quad t<-T_1$$

とする．このとき無限の過去（実は $-T_1$ 以前）に ϕ_α の状態であった系が無限の未来（実は T_2 以後）に ϕ_β の状態に移る確率振幅をポテンシャルの“巾”の一次まで計算すると（36.35）で与えられているごとく

$$\langle\beta|\alpha\rangle-\frac{i}{\hbar}\iint\phi_\beta^*(\mathbf{r},t)V(\mathbf{r},t)\phi_\alpha(\mathbf{r},t)dt\,d^3r \qquad (1)$$

となる．ϕ_α,ϕ_β として H_0 の固有状態をとりその固有値をそれぞれ E_α,E_β とすると

$$\phi_\alpha(\mathbf{r},t)=e^{-iE_\alpha t/\hbar}u_\alpha(\mathbf{r}),$$

$$\phi_\beta(\mathbf{r},t)=e^{-iE_\beta t/\hbar}u_\beta(\mathbf{r})$$

となるから（1）の第二項は

$$(i\hbar)^{-1}\int_{-T_1}^{T_2}\{\int u_\beta^*(\mathbf{r})V(\mathbf{r},t)u_\alpha(\mathbf{r})d^3r\}e^{i\omega_{\beta\alpha}t}dt,\qquad \omega_{\beta\alpha}=\frac{E_\beta-E_\alpha}{\hbar}$$

となる．一方（35.9）［29.8］式とその上の議論において m を α, k を β と名前をつけかえると

$$a_\beta^{(0)}=\langle\beta|\alpha\rangle,$$

$$a_\beta^{(1)}(\infty)=(i\hbar)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}\langle\beta|H'(t')|\alpha\rangle e^{i\omega_{\beta\alpha}t}dt$$

$$=(i\hbar)^{-1}\int_{-T_1}^{T_2}\left\{\int u_\beta^*(\mathbf{r})V(\mathbf{r},t)u_\alpha(\mathbf{r})d^3r\right\}e^{i\omega_{\beta\alpha}t}dt$$

となるから（1）の第一項は $a_\beta^{(0)}$ に等しく，第二項は $a_\beta^{(1)}(\infty)$ に等しいことがわかる.

問題IX-5　［第3版］

(37.7) の右辺で $+i\epsilon$ を $-i\epsilon$ で置き換えた式の値を求め，それが $\theta(\tau)-1$ に等しいことを証明せよ．

〔解〕 $f_\epsilon(\tau)=-\dfrac{1}{2\pi i}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\omega-i\epsilon}d\omega \qquad (\epsilon>0)$

とおく．$\tau>0$ のときは Cauchy の積分定理を実軸 $(-\infty,\infty)$ と無限下半円周 C_- よりなる積分路に適用すると

$$0=-\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\omega-i\epsilon}d\omega-\frac{1}{2\pi i}\int_{C_-}e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\omega-i\epsilon}$$

となり右辺第二項は零であるから

$$f_\epsilon(\tau)=0,\qquad \tau>0 \qquad (1)$$

を得る．また $\tau<0$ のときは実軸 $(-\infty,\infty)$ と無限上半円周 C_+ に Cauchy の積分定理を用いると

$$-\operatorname*{Res}_{\omega=i\epsilon}\left(e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\omega-i\epsilon}\right)$$
$$=-\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\omega-i\epsilon}d\omega$$
$$-\frac{1}{2\pi i}\int_{C_+}e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\omega-i\epsilon}d\omega$$

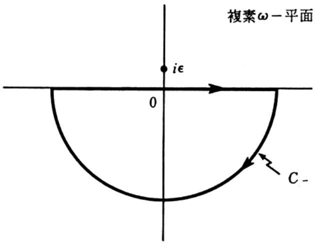
となり右辺第二項は零であり左辺は $-e^{\epsilon\tau}$ であるから

$$f_\epsilon(\tau)=-e^{\epsilon\tau},\qquad \tau<0 \qquad (2)$$

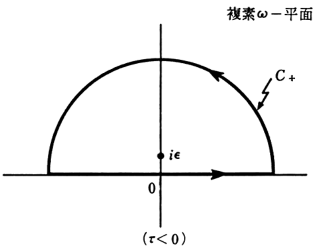
を得る．したがって (1), (2) より

$$\lim_{\epsilon\to0^+}f_\epsilon(\tau)=\begin{Bmatrix}0, & \tau>0\\ -1, & \tau<0\end{Bmatrix}=\theta(\tau)-1$$

となる．



(τ＞0)



(τ＜0)

図　18

〔別解〕 $\theta(\tau)+\theta(-\tau)=1$ を用いると

$$\lim_{\epsilon\to0^+}-\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega\tau}\frac{1}{\omega-i\epsilon}d\omega=\left(\lim_{\epsilon\to0^+}\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega\tau}\frac{1}{\omega+i\epsilon}d\omega\right)^*$$
$$=(-\theta(-\tau))^*=-\theta(-\tau)=\theta(\tau)-1.$$

問題IX-6 ［第3版］

(37.14) をシンボリックに操作してゆくことによって (37.16) を導け．次いでシンボリック関係を使わないで (37.17) を導け．

〔**解**〕 (37.14)，つまり

$$\left[1-\frac{1}{E_\alpha-H_0+i\epsilon}V\right]\chi_\alpha{}^+=u_\alpha$$

の両辺に左から

$$1+\frac{1}{E_\alpha-H+i\epsilon}V$$

を掛ける．このとき $H=H_0+V$ を用いると

$$\left[1+\frac{1}{E_\alpha-H+i\epsilon}V\right]\left[1-\frac{1}{E_\alpha-H_0+i\epsilon}V\right]$$

$$=\frac{1}{E_\alpha-H+i\epsilon}[E_\alpha-H+i\epsilon+V]\frac{1}{E_\alpha-H_0+i\epsilon}[E_\alpha-H_0+i\epsilon-V]$$

$$=\frac{1}{E_\alpha-H+i\epsilon}[E_\alpha-H_0+i\epsilon]\frac{1}{E_\alpha-H_0+i\epsilon}[E_\alpha-H+i\epsilon]$$

$$=\frac{1}{E_\alpha-H+i\epsilon}[E_\alpha-H+i\epsilon]=1$$

となるから

$$\chi_\alpha{}^+=\left[1+\frac{1}{E_\alpha-H+i\epsilon}V\right]u_\alpha$$

を得る．これは (37.16) に他ならない．

次に (37.17) をシンボリック関係を用いずに導く．(37.10)，すなわち

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})=u_\alpha(\mathbf{r})+Cv(\mathbf{r}) \tag{1}$$

において $\chi_\alpha{}^+$ は H の固有値 E_α に属する固有状態であるから

$$0=(H-E_\alpha)\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})=(H_0-E_\alpha)u_\alpha(\mathbf{r})+V(\mathbf{r})u_\alpha+C(H-E_\alpha)v(\mathbf{r})$$

となり u_α は H_0 の固有値 E_α に属する固有状態であることに注意するとこれより v に対する方程式として

$$(H-E_\alpha)v(\mathbf{r})=-\frac{1}{C}V(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r})$$

を得る．これを境界条件 (37.11) を考慮して解くと

$$v(\mathbf{r}')=(\hbar C)^{-1}\int G^{+}_{\omega_\alpha}(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r})d^3r$$

となる．これを（1）に代入すると

$$\chi_\alpha{}^{+}(\mathbf{r}')=u_\alpha(\mathbf{r}')+\hbar^{-1}\int G^{+}_{\omega_\alpha}(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r})d^3r$$

を得る．

問題IX-7　［第3版］

（37.8）式で $+i\epsilon$ を $-i\epsilon$ で置き換えたもので定義されている $G^{-}_{0\omega}(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ を評価し，かつそれを（37.19）と同様な形で求めよ．また置き換え（37.22）が正当化されることを示せ．

〔**解**〕 $G^{+}_{0\omega}(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ の場合と同じく $k^2=2\mu\omega/\hbar$ とおくと

$$G^{-}_{0\omega}(\mathbf{r}',\mathbf{r})=\frac{\mu}{\pi^2\hbar|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|}\int_0^\infty(k^2-k_\alpha{}^2-i\epsilon)^{-1}k_\alpha\sin(k_\alpha|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|)dk_\alpha$$

を得る．$\rho=|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|$ とおくと上の積分は

$$G^{-}_{0\omega}(\mathbf{r}',\mathbf{r})=\frac{\mu}{\pi^2\hbar\rho}\frac{1}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{k^2-k_\alpha{}^2-i\epsilon}k_\alpha e^{ik_\alpha\rho}dk_\alpha \qquad (1)$$

と変形できる．この積分は無限上半円周の積分路をつけ加えることにより Cauchy の積分定理を用いて計算できる．

$\omega>0$ のときは上半面の特異性は $k_\alpha=\sqrt{k^2-i\epsilon}$ に単純極があるだけであるから（1）の右辺は

$$\frac{\mu}{\pi^2\hbar\rho}\frac{1}{2i}\cdot 2\pi i\cdot \operatorname*{Res}_{k_\alpha=\sqrt{k^2-i\epsilon}}\left(\frac{1}{k^2-k_\alpha{}^2-i\epsilon}k_\alpha e^{ik_\alpha\rho}\right)$$

$$=-\frac{\mu}{2\pi\hbar}\cdot\frac{1}{\rho}\cdot e^{i\sqrt{k^2-i\epsilon}\,\rho} \qquad (\omega>0)$$

となる．また $\omega<0$ のときは上半面には $k_\alpha=\sqrt{k^2-i\epsilon}$ に単純極があるだけであるから（1）の右辺は

$$\frac{\mu}{\pi^2\hbar\rho}\cdot\frac{1}{2i}\cdot 2\pi i\cdot \operatorname*{Res}_{k_\alpha=\sqrt{k^2-i\epsilon}}\left(\frac{1}{k^2-k_\alpha{}^2-i\epsilon}k_\alpha e^{ik_\alpha\rho}\right)$$

$$=-\frac{\mu}{2\pi\hbar}\cdot\frac{1}{\rho}\cdot e^{i\sqrt{k^2-i\epsilon}\,\rho} \qquad (\omega<0)$$

となる．ここで $\epsilon\to 0^{+}$ の極限をとると

$$G_{0\omega}^{-}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar}|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^{-1}$$

$$\exp(-ik|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|), \quad \omega>0$$

$$k=+\left(\frac{2\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (2)$$

$$G_{0\omega}^{-}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar}|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^{-1}$$

$$\exp(-k|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|), \quad \omega<0$$

$$k=+\left(\frac{2\mu|\omega|}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$$

を得る．

次に（37.13）から（37.19）までの式は（37.22）により

$$\chi_\alpha{}^+ \to \chi_\alpha{}^-,$$

$$G_{0\omega_\alpha}^{+}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \to G_{0\omega_\alpha}^{-}(\mathbf{r}', \mathbf{r}),$$

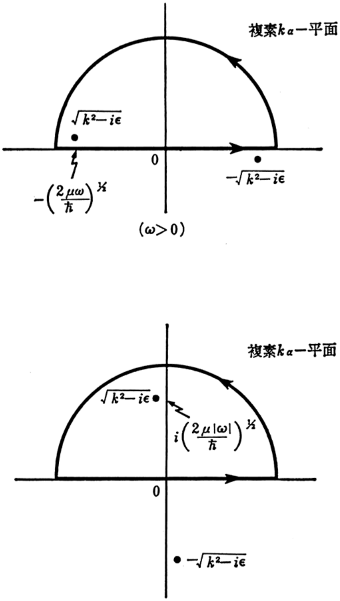
$$i \to -i$$

と置き換えても成り立つことを見よう．まず無限の未来に ϕ_α に近づく波動関数 $\psi_\alpha{}^-$ は

$$\phi_\alpha(\mathbf{r}, t) = u_\alpha(\mathbf{r})e^{-i\omega_\alpha t},$$

$$\psi_\alpha{}^-(\mathbf{r}, t) = \chi_\alpha{}^-(\mathbf{r})e^{-i\omega_\alpha t},$$

$$\chi_\alpha{}^-(\mathbf{r}) = u_\alpha(\mathbf{r}) + Cw(\mathbf{r})$$



(ω<0)

図 19

とおくと w は微分方程式

$$(H_0-E_\alpha)w(\mathbf{r}) = -\frac{1}{C}V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^-(\mathbf{r}) \qquad (3)$$

を満たす．$\chi_\alpha{}^-$ に含まれる散乱された波は入ってくる波であるから w の漸近形は（37.11）のかわりに

$$w(\mathbf{r}') \xrightarrow[r'\to\infty]{} \frac{1}{r'}fe^{-ik_\alpha r'}$$

でなければならない．ところが（2）より

$$G_{0\omega_\alpha}^{-}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \xrightarrow[r'\to\infty]{} -\frac{\mu}{2\pi\hbar r'}e^{-ik_\alpha(r'-r\cos\theta')}$$

が得られるから（3）の解は

$$w(\mathbf{r}')=(\hbar C)^{-1}\int G^{-}_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^{-}(\mathbf{r})d^3r$$

で与えられる．これより $\chi_\alpha{}^{-}$ の従う Lippmann-Schwinger 方程式は

$$\chi_\alpha{}^{-}(\mathbf{r}')=u_\alpha(\mathbf{r}')+\hbar^{-1}\int G^{-}_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^{-}(\mathbf{r})d^3r \qquad (37.13)'$$

となりこれは (37.13) に置き換え $\chi_\alpha{}^{+}\to\chi_\alpha{}^{-}$，$G^{+}_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r}',\mathbf{r})\to G^{-}_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ をほどこしたものに他ならない．また $G^{-}_{0\omega_\alpha}$ は $G^{+}_{0\omega_\alpha}$ の定義式で $+i\epsilon$ を $-i\epsilon$ に置き換えたものであることに注意すると (37.13)′ は記号的に

$$\chi_\alpha{}^{-}=u_\alpha+(E_\alpha-H_0-i\epsilon)^{-1}V\chi_\alpha{}^{-} \qquad (37.14)'$$

となる．そしてこれより問題IX-6と全く同様にして

$$\chi_\alpha{}^{-}=u_\alpha+(E_\alpha-H-i\epsilon)^{-1}Vu_\alpha \qquad (37.16)'$$

も導ける． これらはそれぞれ (37.14)，(37.16) に置き換え (37.22) をほどこしたものになっている．最後に（2）式は (37.19) で左辺 $G^{+}_{0\omega}(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ を $G^{-}_{0\omega}(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ で置き換え右辺の i を $-i$ で置き換えたものになっている．したがって置き換え (37.22) は正当化された．

問題IX-8　［第3版］

(37.31) 式に与えられているような S 行列のユニタリー性を利用して，一般化された光学定理をさらには一つの特別な場合としての光学定理を導け．

〔解〕 (37.31) 式は

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=\delta^3(\mathbf{k}_\beta-\mathbf{k}_\alpha)+\frac{\delta(k_\beta-k_\alpha)}{k_\alpha{}^2}\frac{ik_\alpha}{2\pi}f(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha) \qquad (1)$$

と書き直せる．S 行列のユニタリー性

$$\langle\beta|S^\dagger S|\alpha\rangle=\mathrm{S}_\gamma\langle\beta|S^\dagger|\gamma\rangle\langle\gamma|S|\alpha\rangle$$
$$=\mathrm{S}_\gamma\langle\gamma|S|\beta\rangle^*\langle\gamma|S|\alpha\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle$$

を（1）および (37.30) を用いて具体的に書くと

$$\int\left[\delta^3(\mathbf{k}_\gamma-\mathbf{k}_\beta)-\frac{\delta(k_\gamma-k_\beta)}{k_\beta{}^2}\frac{ik_\beta}{2\pi}f^*(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\beta)\right]$$
$$\times\left[\delta^3(\mathbf{k}_\gamma-\mathbf{k}_\alpha)+\frac{\delta(k_\gamma-k_\alpha)}{k_\alpha{}^2}\frac{ik_\alpha}{2\pi}f(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\alpha)\right]d^3k_\gamma$$
$$=\delta^3(\mathbf{k}_\beta-\mathbf{k}_\alpha) \qquad (2)$$

となりこの左辺の積分を行なうと

$$\delta^3(\mathbf{k}_\beta-\mathbf{k}_\alpha)-\frac{\delta(k_\alpha-k_\beta)}{k_\beta{}^2}\frac{ik_\beta}{2\pi}f^*(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\beta)+\frac{\delta(k_\beta-k_\alpha)}{k_\alpha{}^2}\frac{ik_\alpha}{2\pi}f(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)$$

$$+\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\delta(k_\gamma-k_\beta)\delta(k_\gamma-k_\alpha)}{k_\beta{}^2k_\alpha{}^2}\frac{k_\beta k_\alpha}{4\pi^2}f^*(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\beta)$$

$$\times f(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\alpha)k_\gamma{}^2dk_\gamma\sin\theta_\gamma d\theta_\gamma d\phi_\gamma$$

$$=\delta^3(\mathbf{k}_\beta-\mathbf{k}_\alpha)-\frac{1}{4\pi^2}\delta(k_\beta-k_\alpha)\left[\frac{2\pi i}{k_\alpha}(f^*(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\beta)-f(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha))\right.$$

$$\left.-\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}f^*(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\beta)f(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\alpha)\sin\theta_\gamma d\theta_\gamma d\phi_\gamma\right]$$

となる．ただし $\mathbf{k}_\gamma$ の長さは $k_\alpha=k_\beta$ に等しいものとする．これを（2）式に代入して

$$\frac{2\pi i}{k_\alpha}[f^*(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\beta)-f(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)]=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}f^*(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\beta)f(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\alpha)\sin\theta_\gamma d\theta_\gamma d\phi_\gamma$$

を得る．これが一般光学定理（20.21）である．

特に前方散乱 $\mathbf{k}_\beta=\mathbf{k}_\alpha$ においてはこの式は

$$\frac{4\pi}{k_\alpha}\mathrm{Im}\,[f(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)]=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}|f(\mathbf{k}_\gamma,\mathbf{k}_\alpha)|^2\sin\theta_\gamma d\theta_\gamma d\phi_\gamma$$

となる．これが光学定理である．

問題IX-9 ［第2版，VII-問5に同一］

大きな距離で r^{-n} のように減少してゆく実ポテンシャルによる散乱の全断面積は，$n>2$ の場合に，かつその場合に限って有限になることを，まず（38.2）［26.20］の Born 近似の振幅を使って，次には（38.14）［26.27］の Born 近似の位相のずれを使って証明せよ．

〔解〕 Born 近似の散乱振幅は（38.2）［26.20］により

$$f_B(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2q}\int_0^\infty r\sin qrV(r)dr,\qquad q=2k\sin\tfrac{1}{2}\theta \qquad (1)$$

で与えられる．簡単のためにポテンシャル V はある正の数 r_0 が存在して

$$V(r)=\frac{\alpha}{r^n},\qquad r\geqq r_0\qquad (\alpha：実定数) \qquad (2)$$

であるとする．また $0\leqq r<r_0$ については

$$\int_0^{r_0} r^2|V(r)|dr<\infty \tag{3}$$

を満たしているものとする．そのとき（1）の右辺の積分を

$$-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^{r_0} r\sin qrV(r)dr-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_{r_0}^{\infty} r\sin qrV(r)dr$$

と二つに分け第一項を $f_{B^1}(\theta)$，第二項を $f_{B^2}(\theta)$ とおく．

f_{B^1} については仮定（3）と不等式 $|\sin qr/q|\leqq r$ を用いると

$$|f_{B^1}(\theta)|\leqq\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^{r_0} r^2|V(r)|dr=C_0$$

となり q に無関係な数 C_0 でおさえられる．また f_{B^2} については（2）を代入して

$$f_{B^2}(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_{r_0}^{\infty} r\sin qr\frac{\alpha}{r^n}dr=-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}q^{n-3}\int_{qr_0}^{\infty}\frac{\sin x}{x^{n-1}}dx$$

となる．この積分は $n<2$ なら発散する．また $n\geqq 2$ のときは $q=0$ のときの被積分関数の $x=0$ における特異性に注意してさらに場合を分けると

（イ）　$3>n\geqq 2$ の場合

$$\left|\int_{qr_0}^{\infty}\frac{\sin x}{x^{n-1}}dx\right|\leqq C_1,\ （C_1 \text{ は } q \text{ に無関係}),$$

（ロ）　$n=3$ の場合

$$\left|\int_{qr_0}^{\infty}\frac{\sin x}{x^2}dx\right|\leqq\int_{qr_0}^{A}\frac{1}{x}dx+\int_A^{\infty}\frac{1}{x^2}dx=C_2+C_3|\log(qr_0)|,$$

ただし A は $2kr_0(=\max qr_0)$ よりも大きな定数で C_2, C_3 は q に無関係な定数である．

（ハ）　$n>3$ の場合

$$\left|\int_{qr_0}^{\infty}\frac{\sin x}{x^{n-1}}dx\right|\leqq\int_{qr_0}^{\infty}\frac{1}{x^{n-2}}dx=\frac{1}{n-3}(qr_0)^{3-n}$$

となる．したがって

$$|f_{B^2}(\theta)|\leqq\begin{cases}\dfrac{2\mu|\alpha|}{\hbar^2}q^{n-3}C_1, & (3>n\geqq 2)\\[2ex] \dfrac{2\mu|\alpha|}{\hbar^2}(C_2+C_3|\log(qr_0)|), & (n=3)\\[2ex] \dfrac{2\mu|\alpha|}{\hbar^2}r_0^{3-n}\dfrac{1}{n-3}, & (n>3)\end{cases}$$

を得る．これより Born 近似での全散乱断面積

$$\sigma=\frac{2\pi}{k^2}\int_0^{2k}|f_B(\theta)|^2qdq\leqq\frac{4\pi}{k^2}\int_0^{2k}|f_{B^1}(\theta)|^2qdq+\frac{4\pi}{k^2}\int_0^{2k}|f_{B^2}(\theta)|^2qdq$$

は $n>2$ のときには有限であることがわかる．勿論 $n<2$ のときは無限大になる．$n=2$ のときは f_{B^2} は q が小さいところで

$$f_{B^2}(\theta)\underset{q\simeq0}{\simeq}-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}q^{-1}\left(\int_0^\infty\frac{\sin x}{x}dx\right)$$

のようにふるまうから全断面積は無限大となることがわかる．つまり Born 近似での全断面積は $n>2$ のとき，またそのときのみ有限であることが示された．

次に Born 近似での位相のずれは (38.14) [26.27] により

$$\delta_{Bl}=-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)j_l^2(kr)r^2dr$$

で与えられる．

$$j_l(kr)\sim\frac{(kr)^l}{(2l+1)!!},\qquad r\sim0$$

のふるまいより l がある程度大きくなると上の公式での r が小さいところからの積分の寄与は小さいと考えられるから $V(r)=\alpha/r^n$ $(0<r<\infty)$ とおいてもよいであろう．そのとき

$$\delta_{Bl}=-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\alpha\int_0^\infty r^{2-n}j_l^2(kr)dr$$

$$=-\frac{2\mu k\alpha}{\hbar^2}\frac{\pi}{2k}\int_0^\infty r^{1-n}J^2_{l+\frac{1}{2}}(kr)dr$$

を得る．Bessel 関数の漸近的ふるまい

$$J_\nu(z)\sim\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z-\frac{(2\nu+1)\pi}{4}\right),\quad |z|\text{ 大},\ z\fallingdotseq\text{ 負の実数}$$

よりこの積分は $n>1$ のときにのみ収束することがわかる．そして $n>1$ のときは公式集 p. 193

$$\int_0^\infty x^{-\lambda}J_\mu(ax)J_\nu(ax)dx$$

$$=\frac{a^{\lambda-1}\Gamma(\lambda)\Gamma((\mu+\nu-\lambda+1)/2)}{2^\lambda\Gamma((\lambda+\mu-\nu+1)/2)\Gamma((\lambda-\mu+\nu+1)/2)\Gamma((\lambda+\mu+\nu+1)/2)},$$

$$a>0,\qquad \mathrm{Re}\,\lambda>0,\qquad \mathrm{Re}\,(\mu+\nu-\lambda)>-1$$

に $a=k$，$\lambda=n-1$，$\mu=\nu=l+\frac{1}{2}$ とおくと $2l+3>n$ なる l に対して

$$\delta_{Bl}=-\frac{\alpha\pi\mu}{\hbar^2}\cdot k^{n-2}\cdot\frac{\Gamma(n-1)}{2^{n-1}[\Gamma(n/2)]^2}\cdot\frac{\Gamma(l+\frac{1}{2}-n/2+1)}{\Gamma(l+\frac{1}{2}+n/2)}$$

を得る．l が大きいとき

$$\frac{\Gamma(l+\frac{1}{2}-n/2+1)}{\Gamma(l+\frac{1}{2}+n/2)}\sim\frac{2^{n-1}}{(2l+1)^{n-1}}$$

であるから

$$\delta_{Bl}\simeq-\frac{\alpha\pi\mu}{\hbar^2}\cdot k^{n-2}\cdot\frac{\Gamma(n-1)}{[\Gamma(n/2)]^2}\cdot\frac{1}{(2l+1)^{n-1}}\qquad(l:\text{大})$$

となる．全断面積は (19.13) [〃] により

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

で与えられるから l についての和で l が大きいところからの寄与は

$$\sum_{l:\text{大}}^{\infty}\frac{1}{(2l+1)^{2n-3}}$$

に比例しこの級数は $n>2$ のときに限り収束する．したがって Born 近似の位相のずれから求めた全断面積も $n>2$ のとき，またそのときに限り有限となる．

問題IX-10　［第2版，VII-問6に同一］

実ポテンシャル $V(r)=-V_0e^{-r/a}$ に対する散乱の微分断面積を Born 近似を使って求めよ．この場合の近似の妥当性の判定条件はどうなるか，またどのような情況のもとでこの条件が満たされるか．

〔解〕 Born 近似での散乱振幅は (38.2) [26.20] より

$$f_B(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r\sin qr(-V_0e^{-r/a})dr,\qquad q=2k\sin\tfrac{1}{2}\theta$$

で与えられる．この積分は

$$\begin{aligned}\int_0^\infty r\sin qre^{-r/a}dr&=-\frac{\partial}{\partial q}\int_0^\infty\cos qre^{-r/a}dr\\&=-\frac{\partial}{\partial q}\mathrm{Re}\left[\int_0^\infty e^{iqr}e^{-r/a}dr\right]=-\frac{\partial}{\partial q}\mathrm{Re}\left[\frac{1}{a^{-1}-iq}\right]\\&=-\frac{\partial}{\partial q}\frac{a^{-1}}{q^2+a^{-2}}=\frac{2qa^{-1}}{(q^2+a^{-2})^2}\end{aligned}$$

と計算できるから

$$f_B(\theta)=\frac{4\mu V_0}{\hbar^2 a}\cdot\frac{1}{(q^2+a^{-2})^2} \tag{1}$$

となる．Born 近似での微分断面積 $\sigma_B(\theta)$ は

$$\sigma_B(\theta)=|f_B(\theta)|^2=\frac{16\mu^2V_0{}^2}{\hbar^4a^2}\frac{1}{(q^2+a^{-2})^4}$$

である．

この場合の Born 近似の有効性の規準は (38.4) [26.31] より

$$\left|-\frac{\mu}{\hbar^2 k}\int_0^\infty(e^{2ikr}-1)(-V_0e^{-r/a})dr\right|\ll 1$$

でありこの積分は容易に遂行できて

$$\frac{2|V_0|\mu a^2}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{1+4(ka)^2}}\ll 1 \tag{2}$$

となる．この規準が満たされるのは

i) $\dfrac{2|V_0|\mu a^2}{\hbar^2}\ll 1$ の場合はすべての ka に対して,

ii) $\dfrac{2|V_0|\mu a^2}{\hbar^2}\gtrsim 1$ の場合は $ka\gg 1$ で $\dfrac{|V_0|\mu a}{\hbar^2 k}\ll 1$ のとき

である．

問題IV-8 の結果より

$$\frac{2V_0a^2\mu}{\hbar^2}\geqq\frac{j_{0.1}^2}{4}\simeq 1.4$$

ならこのポテンシャルによる束縛状態が存在するから条件 i) は束縛状態が存在しないための条件であり，条件 ii) はたとえ束縛状態が存在しても入射粒子の速度 $v\equiv\hbar k/\mu$ が $v\gg|V_0|a/\hbar$ を満たせば Born 近似は有効であることを示している．

問題IX-11 ［第2版，VII-問8と同一］

Born 近似を使って同一原子のつくる結晶格子による散乱を定性的に論ぜよ．

〔**解**〕 ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ による Born 近似の散乱振幅は (38.1) [26.18] より

$$f_B(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})d^3r,\qquad \mathbf{q}=\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k}_\beta$$

で与えられる．いまこの結晶の空間格子の基本ベクトルを $\mathbf{a}_i(i=1,2,3)$ とする．つま

り一つの格子点を $\mathbf{r}_0$ とすると他の格子点は n_1, n_2, n_3 を整数として $\mathbf{r}_0+n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3$ とあらわされるものとする．そのときこの結晶によるポテンシャルは周期性

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{a}_i)=V(\mathbf{r}), \quad i=1,2,3$$

を有するから

$$\int V(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})d^3r=\int V(\mathbf{r}+\mathbf{a}_i)\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})d^3r$$

$$=\int V(\mathbf{r}')\exp(i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{a}_i))d^3r'=\exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_i)\int V(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})d^3r$$

となり f_B が零でないのは $\mathbf{q}$ が

$$-\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_i=2\pi h_i, \ (h_i \text{ は整数}) \quad i=1,2,3 \tag{1}$$

を満たす場合のみである．いま $\mathbf{b}_i\cdot\mathbf{a}_j=\delta_{ij}$ を満たす $\mathbf{a}_i(i=1,2,3)$ の相反系 $\mathbf{b}_i(i=1,2,3)$ を導入すると，任意のベクトル $\mathbf{c}$ に対し

$$\mathbf{c}=(\mathbf{c}\cdot\mathbf{a}_1)\mathbf{b}_1+(\mathbf{c}\cdot\mathbf{a}_2)\mathbf{b}_2+(\mathbf{c}\cdot\mathbf{a}_3)\mathbf{b}_3$$

が成り立つから，（１）より

$$\mathbf{k}_\beta-\mathbf{k}_\alpha=2\pi(h_1\mathbf{b}_1+h_2\mathbf{b}_2+h_3\mathbf{b}_3) \tag{2}$$

が得られる．入射波，散乱波の方向の単位ベクトルを $\mathbf{e}_\alpha, \mathbf{e}_\beta$ とし粒子の運動量と対応する波の波長 λ との関係（1.2）[〃] を用いると

$$\mathbf{k}_\alpha=\frac{p_\alpha}{\hbar}\mathbf{e}_\alpha=\frac{2\pi}{\lambda}\mathbf{e}_\alpha, \qquad \mathbf{k}_\beta=\frac{2\pi}{\lambda}\mathbf{e}_\beta$$

となり（２）は

$$\mathbf{e}_\beta-\mathbf{e}_\alpha=\lambda(h_1\mathbf{b}_1+h_2\mathbf{b}_2+h_3\mathbf{b}_3)$$

となる．これは Laue の条件に他ならない．したがってX線による結晶格子の回折と同じように散乱された像は規則正しい斑点となることが期待される．

問題IX-12　［第３版］

光学定理と Born 近似振幅（38.1）[26.18] を用いて実ポテンシャルに対する全断面積を計算し，その結果を吟味せよ．なお，複素ポテンシャルに対して同様の議論を繰り返して行なえ．

〔解〕 光学定理は全散乱断面積を散乱振幅の前方での虚数部分と関連づけるもので

$$\sigma_{\mathrm{tot}}=\frac{4\pi}{k_\alpha}\mathrm{Im}\,[f(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha)] \tag{1}$$

で与えられる．実ポテンシャルに対しては全断面積は

$$\sigma_{\text{tot}}=\int|f(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{2}$$

で定義される．ここに（2）の右辺の積分は $\mathbf{k}$ の大きさは k_α として $\mathbf{k}$ の角部分について行なうことを意味している．散乱振幅として（38.1）[26.18] で与えられる Born 近似の振幅

$$f_B(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\exp(i(\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k}_\beta)\cdot\mathbf{r})d^3r$$

を採用すると

$$f_B(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})d^3r$$

となりこれは明らかに実数であるから（1）を用いて全断面積を求めるとそれは零となってしまう．一方（2）を用いて全断面積を求めると零でない値が得られる．

要するに Born 近似の振幅に対しては光学定理は成り立たないのである．その理由は明らかで（1）の右辺はポテンシャルについて一次であるのに（2）の右辺はポテンシャルについて二次となっているからである．それでは Born 近似をさらに進めてポテンシャルの二次までを考慮した散乱振幅を求めると光学定理はどうなるであろうか．

もともと散乱振幅は（37.21）により

$$f(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\exp(-i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r})V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})d^3r$$

で与えられ（$C=1$ とした），$\chi_\alpha{}^+$ は（37.15）より

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})=\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r})+\hbar^{-1}\int G^+_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\times\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}')d^3r'+\cdots \tag{3}$$

と展開される．$\chi_\alpha{}^+$ に対するこの級数の第一項だけをとったのが Born 近似の振幅

$$f_B{}^{(1)}(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\exp(i(\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k}_\beta)\cdot\mathbf{r})d^3r \tag{4}$$

であるが第二項までとった散乱振幅 $f_B{}^{(2)}$ は（37.18）を用いると

$$f_B{}^{(2)}(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)=f_B{}^{(1)}(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\iint\exp(-i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r})V(\mathbf{r})\times\left\{\frac{1}{\hbar}\frac{\mu}{4\pi^3\hbar}\int\frac{1}{k_\alpha{}^2-k^2+i\epsilon}\exp(i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))d^3k\right\}V(\mathbf{r}')\times\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}')d^3r\,d^3r'$$

$$= f_B^{(1)}(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha) - \frac{1}{2\pi^2}\int \frac{1}{k_\alpha{}^2 - k^2 + i\epsilon}\left\{-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\right.$$

$$\left.\times \exp\left(i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_\beta)\cdot\mathbf{r}\right)d^3r\right\}$$

$$\times\left\{-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r}')\exp\left(i(\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'\right)d^3r'\right\}d^3k$$

$$= f_B^{(1)}(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha) - \frac{1}{2\pi^2}\int \frac{1}{k_\alpha{}^2 - k^2 + i\epsilon} f_B^{(1)}(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}) f_B^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\alpha)d^3k \tag{5}$$

となる．ここで $\mathbf{k}_\beta = \mathbf{k}_\alpha$ とおき実ポテンシャルに対しては $f_B^{(1)}(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}) = f_B^{(1)*}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\alpha)$ が成り立つことを用いると

$$f_B^{(2)}(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha) = f_B^{(1)}(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha) - \frac{1}{2\pi^2}\int \frac{1}{k_\alpha{}^2 - k^2 + i\epsilon}|f_B^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\alpha)|^2 d^3k$$

となり，$f_B^{(2)}(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha)$ の虚数部分は右辺第一項が零であり，第二項において

$$\mathrm{Im}\left[\frac{1}{k_\alpha{}^2 - k^2 + i\epsilon}\right] = -\pi\delta(k_\alpha{}^2 - k^2) = -\pi \times \frac{1}{2k_\alpha}\delta(k_\alpha - k)$$

に注意すると

$$\mathrm{Im}\left[f_B^{(2)}(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha)\right] = \frac{1}{4\pi}\iint_0^\infty \frac{1}{k_\alpha}\delta(k - k_\alpha)|f_B^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\alpha)|^2 k^2 dk\, d\Omega_{\mathbf{k}}$$

$$= \frac{k_\alpha}{4\pi}\int |f_B^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\alpha)|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}$$

となる．一方 Born の第一次近似振幅 $f_B^{(1)}$ より（2）を用いて求めた全断面積を

$$\sigma_{\mathrm{tot}}^{(1)} = \int |f_B^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\alpha)|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}$$

とおくと

$$\sigma_{\mathrm{tot}}^{(1)} = \frac{4\pi}{k_\alpha}\mathrm{Im}\left[f_B^{(2)}(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha)\right] \tag{6}$$

が得られる．つまり第二次 Born 近似振幅 $f_B^{(2)}$ と $f_B^{(1)}$ より求めた全断面積の間に光学定理が成り立つ．

次に複素ポテンシャル

$$V(\mathbf{r}) = V_R(\mathbf{r}) - iV_I(\mathbf{r}) \qquad (V_R, V_I：\text{実関数})$$

に対する Born 近似と光学定理との関係を調べよう．複素ポテンシャルに対する光学定理は（20.23）より

$$\sigma_{\text{tot}}=\sigma_{\text{el}}+\sigma_{\text{abs}}=\frac{4\pi}{k_\alpha}\text{Im}\,[f(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)] \tag{7}$$

で与えられ，σ_{el} は

$$\sigma_{\text{el}}=\int|f(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{8}$$

で定義され σ_{abs} は（20.3）より

$$\sigma_{\text{abs}}=\frac{2\mu}{\hbar^2 k_\alpha}\int V_I(\mathbf{r})|\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})|^2 d^3r \tag{9}$$

で定義されている．第一次 Born 近似振幅は（４）で与えられ前方では

$$f_B{}^{(1)}(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V_R(\mathbf{r})d^3r+i\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V_I(\mathbf{r})d^3r$$

となるから

$$\text{Im}\,[f_B{}^{(1)}(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)]=\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V_I(\mathbf{r})d^3r \tag{10}$$

を得る．一方弾性散乱断面積 σ_{el} は実ポテンシャルの場合と同様ポテンシャルの二次の項からはじまるが吸収断面積 σ_{abs} は（９）の形よりポテンシャルの一次の項からはじまる．その一次の項 $\sigma_{\text{abs}}^{(1)}$ は $\chi_\alpha{}^+$ として（３）の右辺の第一項のみをとったものからの寄与であり $|\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r})|^2=1$ であるから

$$\sigma_{\text{abs}}^{(1)}=\frac{2\mu}{\hbar^2 k_\alpha}\int V_I(\mathbf{r})d^3r$$

となる．これと（10）より

$$\sigma_{\text{abs}}^{(1)}=\frac{4\pi}{k_\alpha}\text{Im}\,[f_B{}^{(1)}(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)]$$

を得る．これが複素ポテンシャルに対する第一次近似での光学定理である．

第二次近似では（５）はそのまま成り立つからいま

$$h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V_R(\mathbf{r})\exp(i(\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r})d^3r,$$

$$h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)=\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V_I(\mathbf{r})\exp(i(\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r})d^3r$$

とおくと（h_R, h_I は実関数ではない！）

$$f_B{}^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)=h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)+ih_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha),$$

$$f_B{}^{(1)}(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k})=h_R{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)+ih_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)$$

とあらわせるから前方では

$$f_B^{(2)}(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)=f_B^{(1)}(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)-\frac{1}{2\pi^2}\int\frac{1}{k_\alpha{}^2-k^2+i\epsilon}\{|h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2$$

$$-|h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2+2i\,\mathrm{Re}\,[h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)h_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)]\}d^3k$$

となる．公式

$$\mathrm{Re}\left[\frac{1}{k_\alpha{}^2-k^2+i\epsilon}\right]=\frac{\mathrm{P}}{k_\alpha{}^2-k^2}\qquad(\mathrm{P}\text{は主値積分を意味する})$$

を用いると虚数部分は

$$\mathrm{Im}\,[f_B^{(2)}(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)]=h_I(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)+\frac{k_\alpha}{4\pi}\int(|h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2-|h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2)d\Omega_{\mathbf{k}}$$

$$-\frac{1}{\pi^2}\int\frac{\mathrm{P}}{k_\alpha{}^2-k^2}\mathrm{Re}\,[h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)h_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)]d^3k \tag{11}$$

で与えられる．一方弾性散乱断面積に対する第一次近似 $\sigma_{\mathrm{el}}^{(1)}$ は（8）の右辺に $f_B^{(1)}$ を代入することにより得られ，それは

$$\sigma_{\mathrm{el}}^{(1)}=\int|f_B^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2d\Omega_{\mathbf{k}}$$

$$=\int(h_R{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)-ih_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha))(h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)+ih_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha))d\Omega_{\mathbf{k}}$$

$$=\int(|h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2+|h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2$$

$$+2\,\mathrm{Im}\,[h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)h_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)])d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{12}$$

で与えられる．また吸収断面積に対する第二次近似 $\sigma_{\mathrm{abs}}^{(2)}$ は（9）の右辺の $|\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})|^2$ としてポテンシャルの第一次までの項をとればよく，それは（3）より

$$1+e^{-i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}}\hbar^{-1}\int\left\{\frac{\mu}{4\pi^3\hbar}\int\frac{1}{k_\alpha{}^2-k^2+i\epsilon}\exp(i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))d^3k\right\}$$

$$\times(V_R(\mathbf{r}')-iV_I(\mathbf{r}'))e^{i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}'}d^3r'$$

$$+e^{i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}}\hbar^{-1}\int\left\{\frac{\mu}{4\pi^3\hbar}\int\frac{1}{k_\alpha{}^2-k^2-i\epsilon}\exp(-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))d^3k\right\}$$

$$\times(V_R(\mathbf{r}')+iV_I(\mathbf{r}'))e^{-i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}'}d^3r'$$

となるから

$$\sigma_{\mathrm{abs}}^{(2)}=\frac{4\pi}{k_\alpha}h_I(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)-\frac{2}{\pi k_\alpha}\int\left(\frac{\mathrm{P}}{k_\alpha{}^2-k^2}-i\pi\delta(k_\alpha{}^2-k^2)\right)(h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)h_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)$$

$$+i|h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2)d^3k-\frac{2}{\pi k_\alpha}\int\left(\frac{\mathrm{P}}{k_\alpha{}^2-k^2}+i\pi\delta(k_\alpha{}^2-k^2)\right)$$

$$\times(h_R{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)-i|h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2)d^3k$$

$$=\frac{4\pi}{k_\alpha}h_I(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)-\frac{4}{\pi k_\alpha}\int\frac{\mathrm{P}}{k_\alpha{}^2-k^2}\mathrm{Re}\,[h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)h_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)]d^3k$$

$$-2\int(|h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2+\mathrm{Im}\,[h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)h_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)])d\Omega_{\mathbf{k}}$$

で与えられる．したがって（12）とこの式を辺々加えて

$$\sigma_{\mathrm{el}}^{(1)}+\sigma_{\mathrm{abs}}^{(2)}=\frac{4\pi}{k_\alpha}\left(h_I(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)+\frac{k_\alpha}{4\pi}\int(|h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2-|h_I(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)|^2)d\Omega_{\mathbf{k}}\right.$$

$$\left.-\frac{1}{\pi^2}\int\frac{\mathrm{P}}{k_\alpha{}^2-k^2}\mathrm{Re}\,[h_R(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)h_I{}^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_\alpha)]d^3k\right)$$

を得る．これと（11）とを比較すると

$$\sigma_{\mathrm{el}}^{(1)}+\sigma_{\mathrm{abs}}^{(2)}=\frac{4\pi}{k_\alpha}\mathrm{Im}\,[f_B{}^{(2)}(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)]$$

が得られ，これが第二近似での光学定理である．

問題IX-13　［第3版］

1個の陽子がある原子によって散乱される．この原子は遮蔽 Coulomb ポテンシャル $-(Ze^2/r\cdot e^{-r/a})$ と原子核に起因する短距離の引力をあらわす深さ $-V_0$，半径Rの実の井戸型ポテンシャルとを一緒にしたもので表わすことができるとする．このとき歪曲波 Born 近似を用いて散乱振幅を計算せよ．ただし，核ポテンシャルによって影響をうけるのは $l=0$ の部分波だけであると仮定して，これを正確に取り扱い，Coulomb 場は一次のオーダーまでの扱いにすること．

〔**解**〕　この近似での散乱振幅は（38.11）より

$$f_{\mathrm{DWBA}}(\theta)=f_1(\theta)+f_{2B}(\theta)-\frac{2\mu}{\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)$$

$$\times\int_0^\infty V_2(r)[R_l{}^2(r)-j_l{}^2(kr)]r^2dr,\qquad(1)$$

$$V_2(r)=-Ze^2/r\cdot e^{-r/a}$$

で与えられる．ここに f_1 は深さ $-V_0$，半径 R の井戸型ポテンシャルによる散乱振幅であり，f_{2B} はポテンシャル V_2 のみによる Born 近似振幅で，R_l は井戸型ポテンシャルによる l 波の動径波動関数である．

まず f_1 を求める．(19.15) [〃]，(19.26) [〃] より

$$\tan\delta_l=\frac{kj_l'(kR)-(\alpha j_l'(\alpha R)/j_l(\alpha R))j_l(kR)}{kn_l'(kR)-(\alpha j_l'(\alpha R)/j_l(\alpha R))n_l(kR)}$$

$$=\frac{kj_{l-1}(kR)j_l(\alpha R)-\alpha j_{l-1}(\alpha R)j_l(kR)}{kn_{l-1}(kR)j_l(\alpha R)-\alpha j_{l-1}(\alpha R)n_l(kR)},$$

ただし

$$\alpha=\sqrt{k^2+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}$$

であるから (15.12) [〃] を用いて

$$e^{2i\delta_l}-1=\frac{2i\tan\delta_l}{1-i\tan\delta_l}=\frac{2(\alpha j_{l-1}(\alpha R)j_l(kR)-kj_{l-1}(kR)j_l(\alpha R))}{kh_{l-1}^{(1)}(kR)j_l(\alpha R)-\alpha j_{l-1}(\alpha R)h_l^{(1)}(kR)}$$

となる．したがって (19.11) [〃] より f_1 は

$$f_1(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{2(\alpha j_{l-1}(\alpha R)j_l(kR)-kj_{l-1}(kR)j_l(\alpha R))}{kh_{l-1}^{(1)}(kR)j_l(\alpha R)-\alpha j_{l-1}(\alpha R)h_l^{(1)}(kR)}P_l(\cos\theta)$$

で与えられる．また f_{2B} は (38.3) をそのまま用いて

$$f_{2B}(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r\sin qr(-Ze^2/r\cdot e^{-r/a})dr$$

$$=\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2(q^2+a^{-2})},\qquad q=2k\sin\tfrac{1}{2}\theta$$

となる．

(1) の右辺第3項の l についての和は題意より $l=0$ 以外は寄与しないとしてよいから

$$-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V_2(r)[R_0^2(r)-j_0^2(kr)]r^2dr \tag{2}$$

となる．このうち j_0 からの寄与は

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V_2(r)j_0^2(kr)r^2dr=\frac{2\mu}{\hbar^2}\cdot(-Ze^2)\cdot\left(\frac{\pi}{2k}\right)\int_0^\infty e^{-r/a}J_{1/2}{}^2(kr)dr$$

と変形しておいて公式集 p. 199：

$$\int_0^\infty e^{-ax}J_\nu(bx)J_\nu(cx)dx=\frac{1}{\pi\sqrt{bc}}Q_{\nu-\frac{1}{2}}\left(\frac{a^2+b^2+c^2}{2bc}\right),$$

$$\mathrm{Re}\,\nu > -\tfrac{1}{2}, \qquad \mathrm{Re}(a \pm ib \pm ic) > 0$$

を用いると

$$-\frac{Ze^2\mu}{\hbar^2 k^2} Q_0\left(1+\frac{1}{2k^2a^2}\right)$$

となる．ここに Q_0 は0次の第二種 Legendre 関数である．一方（2）の R_0 からの寄与を求めるために R_0 の具体的な形を書くと $r>R$ では（19.7）［〃］より

$$R_0(r) = e^{i\delta_0}[\cos\delta_0 j_0(kr) - \sin\delta_0 n_0(kr)],$$

また $r<R$ では（19.25）［〃］より

$$R_0(r) = B_0 j_0(\alpha r)$$

で与えられ，定数 B_0 は $r=R$ における連続性条件より

$$B_0 = \frac{e^{i\delta_0}[\cos\delta_0 j_0(kR) - \sin\delta_0 n_0(kR)]}{j_0(\alpha R)}$$

で与えられる．ここで（15.6）［〃］：

$$j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho}$$

を用いると結局

$$R_0(r) = \begin{cases} \dfrac{e^{i\delta_0}}{k}\dfrac{\sin(kR+\delta_0)}{\sin\alpha R}\cdot\dfrac{\sin\alpha r}{r}, & r<R \\[2ex] \dfrac{e^{i\delta_0}}{k}\dfrac{\sin(kr+\delta_0)}{r}, & r>R \end{cases}$$

となる．これより

$$\begin{aligned} -\frac{2\mu}{\hbar^2}&\int_0^\infty V_2(r)R_0^2(r)r^2dr \\ &= \frac{2Ze^2\mu}{\hbar^2}\cdot\frac{e^{2i\delta_0}}{k^2}\cdot\left\{\frac{\sin^2(kR+\delta_0)}{\sin^2\alpha R}\int_0^R \frac{e^{-r/a}}{r}\sin^2\alpha r dr \right. \\ &\quad \left. + \int_R^\infty \frac{e^{-r/a}}{r}\sin^2(kr+\delta_0)dr\right\} \qquad (3) \end{aligned}$$

と表わされるがこの積分は遂行できそうにない．

〔**注意**〕（3）の右辺の積分の各項は積分指数関数（公式集 p.21）を用いて

$$\begin{aligned} \int_0^R \frac{e^{-r/a}}{r}\sin^2\alpha r dr = \frac{1}{2}&\left\{Q_0\left(1+\frac{1}{2\alpha^2a^2}\right) - \left[-\mathrm{Ei}\left(-R\cdot\frac{1}{a}\right)\right.\right. \\ &\left.\left. + \frac{1}{2}\mathrm{Ei}\left(-R\cdot\left(\frac{1}{a}-2i\alpha\right)\right) + \frac{1}{2}\mathrm{Ei}\left(-R\cdot\left(\frac{1}{a}+2i\alpha\right)\right)\right]\right\}, \end{aligned}$$

$$\int_R^\infty \frac{e^{-r/a}}{r}\cdot\sin^2(kr+\delta_0)dr=\frac{1}{2}\left[-\mathrm{Ei}\left(-R\cdot\frac{1}{a}\right)+\frac{e^{2i\delta_0}}{2}\mathrm{Ei}\left(-R\cdot\left(\frac{1}{a}-2ik\right)\right)\right.$$
$$\left.+\frac{e^{-2i\delta_0}}{2}\mathrm{Ei}\left(-R\cdot\left(\frac{1}{a}+2ik\right)\right)\right]$$

と書けるが，これは積分を遂行したことにはなっていない．

問題IX-14　［第2版，VIII-問5と同一］

摂動論を用いて水素原子の $1S\to 2P$ 励起過程に対する衝突の微分断面積を計算せよ．全断面積は高い入射エネルギーでは（38.29）の直ぐ次に与えられている表式［30.11］になることを証明せよ．

〔**解**〕 水素原子の $n=1$，$l=0$，$m=0$ 状態から $n=2$，$l=1$，$m(m=0,\ \pm1)$ 状態への遷移の Born 近似行列要素は（38.24）（［30.5］と類似）より

$$\langle 2,1,m|H'|1,0,0\rangle$$
$$=|C|^2e^2\iint\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1)\left(\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_1}\right)u_{21m}^*(\mathbf{r}_2)u_{100}(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

で与えられる．（38.26）とその次の式［30.7］を用いればこれは

$$\frac{4\pi|C|^2e^2}{q^2}\int[\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2)-1]u_{21m}^*(\mathbf{r}_2)u_{100}(\mathbf{r}_2)d^3r_2 \qquad (1)$$

に等しくなる．ここに $\mathbf{q}=\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k}_\beta$ であり $\mathbf{k}_\alpha(\mathbf{k}_\beta)$ は始め（終り）の状態における電子の伝播ベクトルである．また u_{100}, u_{21m} は水素原子の波動関数で

$$u_{21m}(\mathbf{r}_2)=R_{21}(r_2)Y_{1m}(\theta_2,\phi_2),$$
$$u_{100}(\mathbf{r}_2)=R_{10}(r_2)Y_{00}(\theta_2,\phi_2)$$

で与えられる．また $k_\beta{}^2$ はエネルギー保存則（38.29）［30.9］より $k_\alpha{}^2$ を用いて

$$k_\beta{}^2=k_\alpha{}^2-\frac{3}{4a_0{}^2} \qquad (2)$$

とあらわされる．

（1）の積分で $[\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2)-1]$ の -1 からの寄与は水素原子の波動関数の直交性より零となり，また $\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2)$ からの寄与は $\mathbf{q}$ を z 軸方向にとると $\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2)=\exp(iqr_2\cos\theta_2)$ となるから $m=0$ 以外は ϕ_2 積分で零になることがわかる．結局零でないのは

$$w=\langle 2,1,0|H'|1,0,0\rangle$$
$$=\frac{4\pi|C|^2e^2}{q^2}\int_0^\infty R_{21}(r_2)R_{10}(r_2)\left\{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}e^{iqr_2\cos\theta_2}Y_{10}{}^*(\theta_2,\phi_2)Y_{00}(\theta_2,\phi_2)\sin\theta_2 d\theta_2 d\phi_2\right\}r_2{}^2dr_2$$

のみであり具体的な関数形

$$R_{10}(r_2)=\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}2e^{-r_2/a_0},$$

$$R_{21}(r_2)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r_2}{a_0\sqrt{3}}e^{-r_2/2a_0},$$

$$Y_{00}(\theta_2,\phi_2)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\qquad Y_{10}(\theta_2,\phi_2)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta_2$$

を代入すると，ϕ_2 積分からは因子 2π が出て，θ_2 積分は

$$\int_{-1}^{+1}e^{iqr_2z}zdz=\frac{2}{iqr_2}\left(\cos qr_2-\frac{1}{qr_2}\sin qr_2\right)$$

と遂行できるから

$$w=2\sqrt{2}\pi|C|^2\frac{e^2}{q^2a_0{}^4}\frac{1}{iq}\int_0^\infty r_2{}^2\left(\cos qr_2-\frac{1}{qr_2}\sin qr_2\right)e^{-3r_2/2a_0}dr_2$$

となる．この r_2 積分は初等的で結局

$$w=|C|^2\times\frac{-24\sqrt{2}\pi a_0{}^2e^2}{iqa_0(q^2a_0{}^2+\frac{9}{4})^3}$$

を得る．これより Born 近似振幅は (38.21) より

$$f_B(\mathbf{k}_\beta,210\,;\,\mathbf{k}_\alpha,100)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2|C|^2}w$$
$$=\frac{12\sqrt{2}a_0{}^2e^2\mu}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{iqa_0(q^2a_0{}^2+\frac{9}{4})^3}=12\sqrt{2}\frac{1}{iq(q^2a_0{}^2+\frac{9}{4})^3}$$
$$\left(\because\quad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)$$

となる．したがって Born 近似の微分断面積は (38.23) [30.6] より

$$\sigma_B(\mathbf{k}_\beta,21\,;\,\mathbf{k}_\alpha,10)=\frac{k_\beta}{k_\alpha}\frac{288}{q^2(q^2a_0{}^2+\frac{9}{4})^6}$$

で与えられる．さらに全断面積は

$$\sigma_{\rm tot}=2\pi\int_0^\pi\sigma_B(\mathbf{k}_\beta,21\,;\,\mathbf{k}_\alpha,10)\sin\theta\,d\theta$$

$$=2\pi\int_{(k_\alpha-k_\beta)^2}^{(k_\alpha+k_\beta)^2}\frac{k_\beta}{k_\alpha}\cdot\frac{288}{q^2(q^2a_0{}^2+\frac{9}{4})^6}\frac{dq^2}{2k_\alpha k_\beta}$$

$$=\frac{288\pi}{k_\alpha{}^2}\cdot\int_{(k_\alpha-k_\beta)^2}^{(k_\alpha+k_\beta)^2}\frac{1}{q^2(q^2a_0{}^2+\frac{9}{4})^6}dq^2$$

となる．この積分は次のようにして行なえばよい．$b>a>0$ とし c を正のパラメーターとするとき

$$g(c\,;b,a)\equiv\int_a^b\frac{dx}{x(x+c)}=\frac{1}{c}\left[\log\frac{a+c}{a}-\log\frac{b+c}{b}\right]$$

の両辺を c で5回（✓）偏微分することにより

$$f(c\,;b,a)\equiv\int_a^b\frac{dx}{x(x+c)^6}=-\frac{1}{5!}\frac{\partial^5}{\partial c^5}g(c\,;b,a)$$

$$=\frac{1}{c^6}\left[\log\frac{a+c}{a}-\log\frac{b+c}{b}\right]$$

$$+\sum_{j=1}^{5}\frac{1}{j}\cdot\frac{1}{c^{6-j}}\cdot\left[\frac{1}{(b+c)^j}-\frac{1}{(a+c)^j}\right]$$

を得るから

$$\sigma_{\rm tot}=\frac{288\pi}{k_\alpha{}^2}f\left(\frac{9}{4}\,;(k_\alpha+k_\beta)^2a_0{}^2,(k_\alpha-k_\beta)^2a_0{}^2\right)$$

となる．特に $k_\alpha a_0\to\infty$ のとき（2）より $(k_\alpha+k_\beta)^2a_0{}^2\simeq(2k_\alpha a_0)^2$，$(k_\alpha-k_\beta)^2a_0{}^2\simeq(3/8k_\alpha a_0)^2$ となるから

$$\sigma_{\rm tot}\simeq\frac{288\pi}{k_\alpha{}^2}\left(\frac{2}{3}\right)^{12}\left[2\log(4k_\alpha a_0)-\left(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{3}+\frac{1}{4}+\frac{1}{5}\right)+O\left(\frac{1}{(k_\alpha a_0)^2}\right)\right]$$

となり，$1S\to2P$ の高エネルギーにおける全断面積は

$$\left(\frac{2}{3}\right)^{12}(576\pi/k_\alpha{}^2)\log(4k_\alpha a_0)$$

のようにふるまうとしてもよいが対数記号の中の因子4はあまり意味がない．むしろ $k_\alpha a_0\to\infty$ のとき $\sigma_{\rm tot}$ の主要項は

$$\left(\frac{2}{3}\right)^{12}(576\pi/k_\alpha{}^2)\log(k_\alpha a_0)$$

であるとした方が正確であり，このふるまいだけを求めるには $\sigma_{\rm tot}$ の q^2 についての積分で $k_\alpha a_0\to\infty$ のとき発散が起こるのは積分の下限からであることに注意して

$$\sigma_{\rm tot}\simeq\frac{288\pi}{k_\alpha{}^2}\int_{(k_\alpha-k_\beta)^2a_0{}^2}^{*}\frac{1}{q^2(\frac{9}{4})^6}dq^2\simeq-\frac{288\pi}{k_\alpha{}^2}\left(\frac{2}{3}\right)^{12}2\log|k_\alpha-k_\beta|a_0$$

とすればよい．

問題IX-15 ［第3版］

V_0 および ξ を正であるとして，$r<a$ で $V(r)=-V_0(1+i\xi)$, $r>a$ で $V(r)=0$ で定義されるポテンシャルによる散乱に対する全断面積をアイコナル近似を用いて計算せよ．この結果と第V章問題11で得られた結果とが当然一致すべきであると信じられるような情況を求めて，その際に実際に一致がみられるかどうかを吟味せよ．

〔解〕 アイコナル近似は本文中の議論より

$$\left|\frac{\nabla k}{k^2}\right|\ll 1, \qquad k(\mathbf{r})=+\frac{1}{\hbar}\{2\mu[E_\alpha-V(\mathbf{r})]\}^{\frac{1}{2}}$$

$$|V(\mathbf{r})|\ll E_\alpha$$

のとき良い近似となる．与えられたポテンシャルに対して $|\nabla V|\simeq V_0/a$ と見なすと上の条件は，ξ を1よりあまり大きい数ではないとして

$$\frac{2\mu V_0 a}{\hbar^2 k_\alpha}\ll k_\alpha a, \qquad \frac{2\mu V_0 a}{\hbar^2 k_\alpha}\ll (k_\alpha a)^2 \tag{1}$$

となる．このとき（38.44）で与えられるアイコナル近似の散乱振幅 $f^I(\theta)$：

$$f^I(\theta)=ik_\alpha\int_0^\infty J_0(qb)\left\{1-\exp\left[-\frac{i}{\hbar v_\alpha}\int_{-\infty}^\infty V(b,z)dz\right]\right\}bdb$$

においてポテンシャルは

$$V(b,z)=\begin{cases}-V_0(1+i\xi), & b^2+z^2<a^2\\ 0\quad , & b^2+z^2>a^2\end{cases}$$

であるから

$$\int_{-\infty}^\infty V(b,z)dz=\begin{cases}-2V_0(1+i\xi)\sqrt{a^2-b^2}, & a>b\\ 0\quad , & a<b\end{cases}$$

となり f^I は

$$f^I(\theta)=ik_\alpha\int_0^a J_0(qb)\left\{1-\exp\left[\frac{2V_0 i}{\hbar v_\alpha}(1+i\xi)\sqrt{a^2-b^2}\right]\right\}bdb \tag{2}$$

となる．これより全断面積は光学定理を用いて

$$\sigma_{\mathrm{tot}}^{I}=\frac{4\pi}{k_\alpha}\mathrm{Im}\,[f^{I}(\theta=0)]=4\pi\int_0^a\left\{1-\cos\left[\frac{2V_0}{\hbar v_\alpha}\sqrt{a^2-b^2}\right]\right.$$
$$\left.\times\exp\left[-\frac{2V_0}{\hbar v_\alpha}\xi\sqrt{a^2-b^2}\right]\right\}b\,db \qquad (3)$$

で与えられることがわかる．（なおこの式は（38.41）より直接導ける．）この積分は，たとえば $\sqrt{a^2-b^2}=x$ と変数変換をすることにより，容易に遂行でき，結果は

$$\frac{2V_0a}{\hbar v_\alpha}=\frac{2\mu V_0a}{\hbar^2k_\alpha}=\beta$$

とおくと

$$\sigma_{\mathrm{tot}}^{I}=4\pi a^2\left\{\frac{1}{2}-\frac{1}{\beta(1+\xi^2)}\left[e^{-\beta\xi}\left(\sin\beta+\frac{1-\xi^2}{1+\xi^2}\frac{\cos\beta}{\beta}\right)-\frac{1-\xi^2}{1+\xi^2}\frac{1}{\beta}\right]\right.$$
$$\left.+\xi\cdot\frac{e^{-\beta\xi}}{\beta(1+\xi^2)}\left(\cos\beta-\frac{2}{1+\xi^2}\frac{\sin\beta}{\beta}\right)\right\} \qquad (4)$$

となる．なお，このうち弾性散乱断面積 σ_{el}^{I}，吸収断面積 $\sigma_{\mathrm{abs}}^{I}$ からの寄与は（38.42），（38.43）より

$$\sigma_{\mathrm{el}}^{I}=4\pi a^2\left\{\frac{1}{4}-\frac{1}{\beta(1+\xi^2)}\left[e^{-\beta\xi}\left(\sin\beta+\frac{1-\xi^2}{1+\xi^2}\frac{\cos\beta}{\beta}\right)-\frac{1-\xi^2}{1+\xi^2}\frac{1}{\beta}\right]\right.$$
$$\left.+\xi\frac{e^{-\beta\xi}}{\beta(1+\xi^2)}\left(\cos\beta-\frac{2}{1+\xi^2}\frac{\sin\beta}{\beta}\right)+\frac{1}{4\beta\xi}\left(\frac{1-e^{-2\beta\xi}}{2\beta\xi}-e^{-2\beta\xi}\right)\right\},$$
$$\sigma_{\mathrm{abs}}^{I}=4\pi a^2\left\{\frac{1}{4}-\frac{1}{4\beta\xi}\left(\frac{1-e^{-2\beta\xi}}{2\beta\xi}-e^{-2\beta\xi}\right)\right\} \qquad (5)$$

となる．（勿論 $\sigma_{\mathrm{tot}}^{I}=\sigma_{\mathrm{el}}^{I}+\sigma_{\mathrm{abs}}^{I}$ が成り立っている．）

一方問題V-11では $k_\alpha a\ll1$，$\xi\ll1$ を仮定したからこれと条件（1）とをあわせると

$$\beta\ll(k_\alpha a)^2\ll k_\alpha a\ll1,$$
$$\xi\ll1 \qquad (6)$$

となりこの条件が満たされていれば両者の結果は一致すると予想される．（6）の下で（5）より

$$\sigma_{\mathrm{el}}^{I}\approx4\pi a^2\times\frac{1}{8}\beta^2,$$
$$\sigma_{\mathrm{abs}}^{I}\approx4\pi a^2\times\frac{1}{3}\beta\xi \qquad (7)$$

を得る．また問題V-**11**の結果（5），（6）において $\eta^2=2\mu V_0a^2/\hbar^2=\beta k_\alpha a\ll 1$ であるから

$$\begin{aligned}\sigma_{\rm el}^0&\equiv 4\pi a^2\left(\frac{\tan\eta}{\eta}-1\right)^2\approx 4\pi a^2\left(\frac{\eta^2}{3}\right)^2=4\pi a^2\cdot\frac{1}{9}\beta^2(k_\alpha a)^2,\\ \sigma_{\rm abs}^0&\equiv 2\pi\frac{a}{k_\alpha}\xi\frac{1-\sin\eta\cdot\cos\eta/\eta}{\cos^2\eta}\approx 2\pi\frac{a}{k_\alpha}\xi\frac{2}{3}\eta^2=4\pi a^2\frac{1}{3}\beta\xi\end{aligned}\tag{8}$$

となる．（7）と（8）を比較すると吸収断面積のふるまいは一致しているが弾性散乱断面積については $\sigma_{\rm el}^I$ の方が $\sigma_{\rm el}^0$ よりも $(k_\alpha a)^{-2}$ 程度大きくなっている．

この原因は $\sigma_{\rm el}^I$ の定義 (38.42)：

$$\sigma_{\rm el}^I=\frac{1}{k_\alpha{}^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|f^I(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)|^2dq_xdq_y$$

において q_x, q_y についての積分は実際は $(q_x{}^2+q_y{}^2)a^2\leqq(2k_\alpha a)^2$ に限られるのにそれを無限に大きくなれると見なしたためであり，これは（6）の状況の下ではきわめて悪い近似になっているからである．したがって弾性散乱断面積は（2）で与えられる $f^I(\theta)$ より $2\pi\int_0^\pi|f^I(\theta)|^2\sin\theta\,d\theta$ として求める方が良い近似になっているであろう．実際条件（6）の下では

$$\begin{aligned}f^I(\theta)&\approx -ik_\alpha\int_0^a J_0(qb)i\beta\frac{\sqrt{a^2-b^2}}{a}b\,db\\ &\approx\frac{k_\alpha\beta}{a}\int_0^a\sqrt{a^2-b^2}b\,db=\frac{k_\alpha\beta}{3}a^2\end{aligned}\tag{9}$$

となり弾性散乱断面積は

$$2\pi\int_0^\pi|f^I(\theta)|^2\sin\theta\,d\theta\approx 4\pi a^2\cdot\frac{1}{9}\beta^2(k_\alpha a)^2$$

と近似され（8）の $\sigma_{\rm el}^0$ と一致している．

弾性散乱断面積についてもう少し論議をするために $k_\alpha a$ の大きさの程度を定めないでただ $\beta\ll 1$, $\xi\ll 1$ と仮定しよう． このとき Born 近似が有効であることはその規準 (38.4) [26.31]

$$|v(0)|\approx\frac{\mu}{\hbar^2k_\alpha}\left|\int_0^\infty(e^{2ik_\alpha r}-1)V(r)dr\right|\ll 1$$

を井戸型ポテンシャルに適用すると

$$|v(0)|\approx\frac{\mu V_0}{\hbar^2k_\alpha}\left|\int_0^a(e^{2ik_\alpha r}-1)dr\right|\leqq\frac{2\mu V_0a}{\hbar^2k_\alpha}=\beta\ll 1$$

となり確かに規準が満たされている．このとき Born 近似の散乱振幅は (38.2) [26.20] より

$$f_B(\theta)=\frac{2\mu V_0(1+i\xi)}{\hbar^2 q}\frac{1}{q}\left[\frac{\sin qa}{q}-a\cos qa\right],\quad q=2k_\alpha\sin\tfrac{1}{2}\theta \qquad (10)$$

となる．(実は f_B は (9) 式の中間の項に $(1+i\xi)$ を乗じたものに等しくなっている．) これより弾性散乱断面積は1に対して ξ^2 を無視すると

$$\sigma_{\rm el}^B=\frac{2\pi}{k_\alpha{}^2}\int_0^{2k_\alpha}|f_B(\theta)|^2 q\,dq\approx\frac{8\pi\mu^2V_0{}^2}{\hbar^4k_\alpha{}^2}\int_0^{2k_\alpha}\frac{1}{q^3}\left[\frac{\sin qa}{q}-a\cos qa\right]^2dq$$

$$=2\pi a^2\beta^2\int_0^{2k_\alpha a}\frac{1}{x^3}\left[\frac{\sin x}{x}-\cos x\right]^2dx$$

となりこの積分は球 Bessel 関数の性質を用いると遂行できて

$$\sigma_{\rm el}^B\approx4\pi a^2\beta^2\frac{1}{8}[1-(j_0{}^2(2k_\alpha a)+j_1{}^2(2k_\alpha a))]$$

となる．そして $k_\alpha a\gg1$ と $k_\alpha a\ll1$ のときのふるまいとして

$$\sigma_{\rm el}^B\approx4\pi a^2\frac{1}{8}\beta^2,\qquad k_\alpha a\gg1$$

$$\sigma_{\rm el}^B\approx4\pi a^2\frac{1}{9}\beta^2(k_\alpha a)^2,\qquad k_\alpha a\ll1$$

を得る．これと (7)，(8) を比較すると $k_\alpha a\gg1$ のとき $\sigma_{\rm el}^B$ と $\sigma_{\rm el}^I$ とは同じようにふるまい，また $k_\alpha a\ll1$ のとき $\sigma_{\rm el}^B$ と $\sigma_{\rm el}^0$ とが等しくふるまうことがわかる．念のために Born 近似での吸収断面積 $\sigma_{\rm abs}^B$ は (10) より

$$\sigma_{\rm abs}^B=\frac{4\pi}{k_\alpha}{\rm Im}\,[f_B(\theta=0)]=\frac{4\pi}{k_\alpha}\frac{2\mu V_0\xi}{\hbar^2}\frac{1}{3}a^3=4\pi a^2\cdot\frac{1}{3}\beta\xi$$

となりこれは $\sigma_{\rm abs}^I$ とも σ_{abs}^0 とも一致している．

要するにアイコナル近似での弾性散乱断面積 (38.42) は条件 (1) の他に $k_\alpha a\gg1$ という条件が満たされているときによい近似となりこのときは光学定理もよい近似で成り立つが，$k_\alpha a\ll1$ では光学定理は成り立たないのである．

問題IX-16　[第3版]

$l=0$ に対する Jost 関数 $f_0(k)$ を，深さが $-V_0$ で半径が a の実の井戸型引力ポテンシャルについて計算し，それを用いてこのポテンシャル内の任意の束縛状態について，またこのポテンシャルによる散乱の位相のずれについて，できる限りの議論を行なえ．

〔**解**〕 このポテンシャルをもつ $l=0$ の Schrödinger 方程式

$$\frac{d^2\phi_0(k,r)}{dr^2}+\left(k^2+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\right)\phi_0(k,r)=0, \qquad 0\leqq r<a \tag{1}$$

$$\frac{d^2\phi_0(k,r)}{dr^2}+k^2\phi_0(k,r)=0, \qquad r>a \tag{2}$$

で境界条件 (39.1)：

$$\phi_0(k,r)\to r \qquad (r\to 0) \tag{3}$$

を満たす解を求める．

$$k'=\sqrt{k^2+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}$$

とおくと（1）の解で（3）を満たすものは一意的に定まり

$$\phi_0(k,r)=\frac{\sin k'r}{k'}, \qquad 0\leqq r<a \tag{4}$$

で与えられる．また（2）の一般解

$$\phi_0(k,r)=Ae^{ikr}+Be^{-ikr}, \quad (A,B:\text{定数}) \qquad r>a \tag{5}$$

で内部解（4）との $r=a$ における連続性条件：

$$\frac{\sin k'a}{k'}=Ae^{ika}+Be^{-ika},$$

$$\cos k'a=ik(Ae^{ika}-Be^{-ika})$$

より A, B を求めると

$$A=\frac{1}{2ik}e^{-ika}\left(ik\frac{\sin k'a}{k'}+\cos k'a\right),$$

$$B=-\frac{1}{2ik}e^{ika}\left(-ik\frac{\sin k'a}{k'}+\cos k'a\right) \tag{6}$$

となる．Jost 関数の定義 (39.11)：

$$\phi_0(k,r)\xrightarrow[r\to\infty]{}\frac{i}{2k}[f_0(-k)e^{-ikr}-f_0(k)e^{ikr}]$$

と（5）とを比較すると（6）より

$$f_0(k)=2ikA=e^{-ika}\left(ik\frac{\sin k'a}{k'}+\cos k'a\right) \tag{7}$$

$$\left(f_0(-k)=-2ikB=e^{ika}\left(-ik\frac{\sin k'a}{k'}+\cos k'a\right)\right)$$

を得る．また位相のずれは（39.13）：

$$S_0(k)=e^{2i\delta_0(k)}=\frac{f_0(k)}{f_0(-k)}$$

で定義されているから（7）より

$$e^{2i\delta_0(k)}=e^{-2ika}\cdot\frac{k'\cos k'a+ik\sin k'a}{k'\cos k'a-ik\sin k'a} \tag{8}$$

で与えられる．

まず束縛状態について議論しよう．束縛状態は（39.20）により Jost 関数の零点

$$f_0(-i\kappa)=0,\qquad \kappa>0$$

で与えられそのときの束縛状態のエネルギーは $-\hbar^2\kappa^2/2\mu$ である．（7）よりこの条件は

$$\kappa\frac{\sin\sqrt{\dfrac{2\mu V_0}{\hbar^2}-\kappa^2}a}{\sqrt{\dfrac{2\mu V_0}{\hbar^2}-\kappa^2}}+\cos\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}-\kappa^2}a=0$$

となり（15.2）[〃] のごとく

$$\alpha=\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}-\kappa^2},\qquad \beta=\kappa$$

とおくと

$$\alpha\cot\alpha a=-\beta$$

を得る．これは（15.3）[〃] に他ならない．そしてそのときの議論により

$$\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}a\leqq\frac{\pi}{2} \tag{9}$$

なら束縛状態は存在せず，また $n=1,2,\cdots$ に対し

$$\frac{2n-1}{2}\pi<\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}a\leqq\frac{2n+1}{2}\pi \tag{10}$$

なら束縛状態は n 個存在する．

次に位相のずれについて議論しよう．

$$\varphi(k)=\frac{1}{2i}\log\left[\frac{k'\cos k'a+ik\sin k'a}{k'\cos k'a-ik\sin k'a}\right] \tag{11}$$

とおくと（8）より

$$\delta_0(k)=\varphi(k)-ka \tag{12}$$

を得る．ただし（11）の対数の分枝のとり方を適当に定めれば（12）が成り立つという意味である．ここで

$$z=\frac{k'\cos k'a+ik\sin k'a}{k'\cos k'a-ik\sin k'a}$$

とおき k を零から単調に増大させたときの複素平面内の単位円周上の z のふるまいを見よう．まず

$$\gamma\equiv\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}a$$

とおき γ の大きさによって場合を三つに分ける：

i)　$n\pi\leqq\gamma<\dfrac{2n+1}{2}\pi,$

$n=0,1,2,\cdots,$

ii)　$\gamma=\dfrac{2n+1}{2}\pi,$

$n=0,1,2,\cdots,$

iii)　$\dfrac{2n-1}{2}\pi<\gamma<n\pi,$

$n=1,2,3,\cdots.$

（9），（10）より容易にわかるようにいずれの場合にも束縛状態の数は n となっている．

i）の場合には $k=0$ $(k'a=\gamma)$ のとき z は $+1$ にあり，$k'a$ がふえる（k がふえるということと同じ）につれて z は正の方向（反時計まわり）に単位円周上を動き $k'a=(2n+1)\pi/2$ で -1 に達し $k'a=(n+1)\pi$ でもとの $+1$ にかえる．これから後も $k'a$ が π 増すごとに一周して $+1$ にかえってく

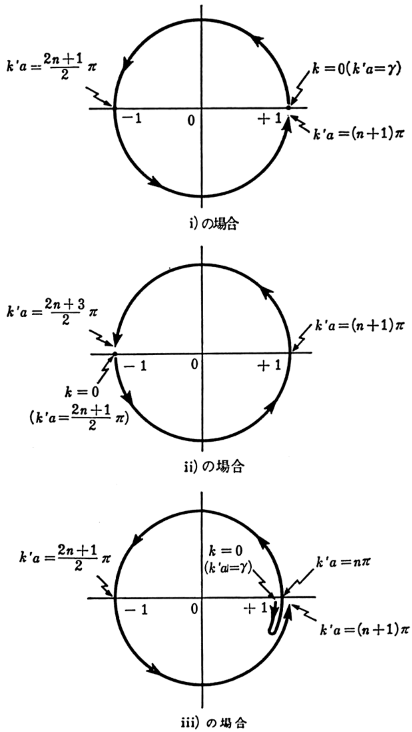


図 20

る．

ii）の場合には $k=0$ ($k'a=(2n+1)\pi/2$) のとき z は -1 にあり $k'a$ がふえるにしたがい z は正の方向にまわり $k'a=(n+1)\pi$ で$+1$に，そして $k'a=(2n+3)\pi/2$ でもとの -1 にかえり，それ以後 $k'a$ が π 増すごとに一周してもとの -1 にかえってくる．

iii）の場合は z の動きはやや複雑で $k=0$ のとき $z=+1$ であるのは i）と同じであるが $k'a$ がふえはじめると z は負の方向にまわりやがて（-1 に達することなしに）ひきかえしそれからは常に正の方向にまわり $k'a=n\pi$ でふたたび $+1$ を通り $k'a=(2n+1)\pi/2$ で -1，そして $k'a=(n+1)\pi$ ではじめて一周を完了し $+1$ にもどり，それ以後は $k'a$ が π 増すごとに一周して $+1$ にかえってくる．

以上の考察より i）および iii）の場合には N を $n+1$ より大きな整数とすると

$$\varphi(k'a=N\pi)-\varphi(k=+0)=\frac{1}{2i}[(N-n)2\pi i]=(N-n)\pi$$

が成り立つ．一方 $k'a=N\pi$ のとき

$$ka=\sqrt{(k'a)^2-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}a^2}=N\pi\sqrt{1-\frac{2\mu V_0 a^2}{N^2\pi^2\hbar^2}}$$

であるから（12）より

$$\delta_0(k=+0)-\delta_0(k'a=N\pi)=n\pi-N\pi\left(1-\sqrt{1-\frac{2\mu V_0 a^2}{N^2\pi^2\hbar^2}}\right)$$

となり（まだ φ の分枝のとり方は指定していないが差を計算しているのであるから分枝には依らない）$N\to\infty$ として

$$\delta_0(+0)-\delta_0(+\infty)=n\pi \tag{13}$$

を得る．

また ii）の場合は

$$\varphi\left(k'a=\frac{2N+1}{2}\pi\right)-\varphi(k=+0)=(N-n)\pi$$

となり $k'a=(2N+1)\pi/2$ のとき

$$ka=\frac{2N+1}{2}\pi\sqrt{1-\frac{8\mu V_0 a^2}{(2N+1)^2\pi^2\hbar^2}}=(N+\tfrac{1}{2})\pi+0(N^{-1})\qquad(N\to\infty)$$

に注意すると

$$\delta_0(+0)-\delta_0(+\infty)=(n+\tfrac{1}{2})\pi \tag{14}$$

を得る．通常位相のずれは（39.31）のように $\delta_0(k)\to 0$ ($k\to+\infty$) の分枝をとるか

ら，このとき（13)，（14）は

$$\delta_0(+0)=n\pi, \qquad f_0(0)=\cos\gamma\neq 0$$

$$\delta_0(+0)=(n+\tfrac{1}{2})\pi, \qquad f_0(0)=\cos\gamma=0$$

と書くことができる．nは束縛状態の数であるからこれは Levinson の定理（39.36）に他ならない．

第 X 章

同一粒子とスピン

問題 X-1 〔第3版〕

3個の対象についての $3!=6$ 個の置換を表現する6個の 2×2 ユニタリー行列の組を求めよ．

〔解〕 3個のものの置換からなる三次の対称群 S_3 は6個の元からなるが，それを次のようにとる．

$$E=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}\qquad P=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}=(1\ 2\ 3)\quad P^2=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix}=(1\ 3\ 2)$$
$$P_1=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}=(2\ 3)\quad P_2=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}=(3\ 1)\qquad P_3=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}=(1\ 2)\tag{1}$$

（1）の任意の二つの元の積 AB も再び（1）のいずれかになる．たとえば $PP_1=P_3$ であるが，その結合則は（1）から確かめられ次の通りである．表は AB より生成される元を示す．

A \ B	E	P	P^2	P_1	P_2	P_3
E	E	P	P^2	P_1	P_2	P_3
P	P	P^2	E	P_3	P_1	P_2
P^2	P^2	E	P	P_2	P_3	P_1
P_1	P_1	P_2	P_3	E	P	P^2
P_2	P_2	P_3	P_1	P^2	E	P
P_3	P_3	P_1	P_2	P	P^2	E

（2）

さて（1）の行列表現を求めるには，（1）に限らず6個の元からなる群で元の間の結合法則が（2）と同じ関係で与えられる操作（演算）をみつけ，その2行2列の行列による表現を求めればよいわけである．演算が決まれば，行列による表現はすぐ作ることができる．すなわち適当に n 次元空間の基底 $u_1, u_2, \cdots, u_n$ をとり，（1）またはそれに同値な演算のもとで引き起こされる $u_1, u_2, \cdots, u_n$ 間の一次変換を考えれば，この一

次変換を表わす行列は，n 次の行列による表現を与える．あとはこの行列表現を適当な正則行列によって簡約を行なえばよい*)．

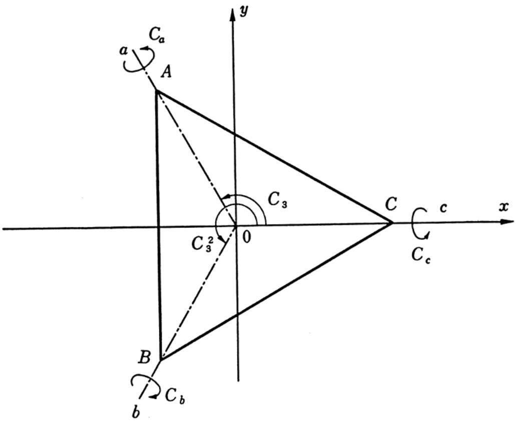


図　21

以下そのいくつかの例をあげてみる．

a）具体的な操作として平面上の正三角形をそれ自身に写す操作を考えてみよう（図参照）．これを三次元空間の回転により引き起こされるものと考えれば，正三角形をそれ自身に写す操作は次の6個である．

E；三角形を動かさない（恒等変換）

$C_3, C_3{}^2$；中心を通り三角形に垂直な軸の回りの $\frac{2}{3}\pi$，および $\frac{4}{3}\pi$ だけの回転

C_a, C_b, C_c；それぞれ対称軸 a, b, c の回りの π だけの回転

ただしこれらの回転軸は空間に固定しておくものとする．

すると上の6個の装作と（1）（2）で与えた6個の元の間には

$$\begin{array}{lll} E \leftrightarrow E & C_3 \leftrightarrow P & C_3{}^2 \leftrightarrow P^2 \\ C_a \leftrightarrow P_1 & C_b \leftrightarrow P_2 & C_c \leftrightarrow P_3 \end{array} \qquad (3)$$

なる一対一の対応関係が成立することが確かめられる．たとえば操作 C_3, C_a を引き続

*)　対称群 S_3 の既約表現は一次の完全対称表現（恒等表現），一次の反対称表現，および二次の行列による表現の3種であり，S_3 の行列による表現を簡約すれば，このいずれかに帰着する．

いて行なえば，A, C にあった点は次のように位置を変え，Bにあった点は動かない．

$$A \xrightarrow{C_3} B \xrightarrow{C_a} C, \qquad C \xrightarrow{C_3} A \xrightarrow{C_a} A$$

これは全体として C_b を行なったと同じだから $C_aC_3=C_b$ となるがこれは $P_1P=P_2$ に対応する．

さて回転により三次元空間のベクトルの成分の受ける変換は（27.2）の形で与えられるが，上の6個の回転を表わす行列は（3）の対応関係があるので，三次元空間の x, y, z 方向の単位ベクトルを基底としたときの対称群 S_3 の三次の行列表現を与える．すなわち*)

$$U_R(E)=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad U_R(C_3)=\begin{bmatrix} \cos\frac{2}{3}\pi & \sin\frac{2}{3}\pi & 0 \\ -\sin\frac{2}{3}\pi & \cos\frac{2}{3}\pi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$U_R(C_3^2)=\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad U_R(C_a)=\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{4}$$

$$U_R(C_b)=\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad U_R(C_c)=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

（4）からすぐわかるようにこの表現では，表現空間が xy の張る二次元空間と，z 方向の一次元空間にわかれる．前者より基底を

*)（4）は回転を座標軸に対して行なったとしたときのものである．もしベクトルに対する操作としたときは C_3 と C_3^2, C_a と C_b に対応する行列が入れ換る．

$$\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

とする対称群 S_3 の二次の行列表現

$$E=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}\qquad P=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}\quad P^2=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

$$P_1=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{bmatrix}\quad P_2=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{bmatrix}\quad P_3=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\tag{5}$$

が得られ，後者より，一次元のベクトル［1］を基底とする一次の反対称表現

$$E,P,P^2=[1]\qquad P_1,P_2,P_3=[-1]\tag{6}$$

が得られる．

上で扱った操作を二次元空間における回転および反転の組合せと考え変換の行列を書けば直ちに（5）が得られる．

b）次に対称群 S_3 の元によって引き起こされるベクトルの変換としてベクトルの成分の置換を考える．たとえば

$$(x_1,x_2,x_3)\xrightarrow{(123)}(x_2,x_3,x_1),\qquad (x_1,x_2,x_3)\xrightarrow{(23)}(x_1,x_3,x_2)$$

のように変換をうけるものとする．これより基底

$$\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}\tag{7}$$

が対称群 S_3 の元によってうける変換を表わす三次の行列表現

$$U(E)=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\qquad U(P)=\begin{bmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{bmatrix}\qquad U(P^2)=\begin{bmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{bmatrix}$$

$$U(P_1)=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\qquad U(P_2)=\begin{bmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{bmatrix}\qquad U(P_3)=\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}\tag{8}$$

が得られる．

（8）はユニタリー変換によって一次および二次の表現に簡約できる．すなわち（8）

はベクトル

$$v=\left(\frac{1}{\sqrt{3}},\ \frac{1}{\sqrt{3}},\ \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \tag{9}$$

の張る空間を不変に保つ．すなわち v は一次の恒等表現の基底をなす．v に直交する二つのベクトルとして

$$\begin{aligned} u_1&=\left(\frac{2}{\sqrt{6}},\ -\frac{1}{\sqrt{6}},-\frac{1}{\sqrt{6}}\right)\\ u_2&=\left(\ 0,\ -\frac{1}{\sqrt{2}},\ \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\end{aligned} \tag{10}$$

をとると，v, u_1, u_2 を（7）の形に移すユニタリー変換は

$$U=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}\sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2}\\ 2 & -1 & -1\\ 0 & -\sqrt{3} & \sqrt{3}\end{pmatrix} \tag{11}$$

で与えられる．この変換によりたとえば（8）の $U(P)$ は

$$\begin{aligned} UU(P)U^{-1}&=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}\sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2}\\ 2 & -1 & -1\\ 0 & -\sqrt{3} & \sqrt{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 2 & 0\\ \sqrt{2} & -1 & -\sqrt{3}\\ \sqrt{2} & -1 & \sqrt{3}\end{pmatrix}\\ &=\left(\begin{array}{c|cc}1 & 0 & 0\\ \hline 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{array}\right)\end{aligned} \tag{12}$$

となって表現空間が分かれることが確かめられる．これより得られる二次の行列表現は基底を

$$u_1 \longrightarrow u_1'=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \qquad u_2 \longrightarrow u_2'=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \tag{13}$$

ととって

$$\begin{aligned} &E'=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix} \quad P'=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix} \quad P^{2\prime}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\\ &P_1'=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix} \quad P_2'=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix} \quad P_3'=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{14}$$

この表現は（5）と少し異なるが，これは基底（10）の選び方による．ここでは後の問8を考慮して u_1, u_2 を選んでおいた．

c）対称群 S_3 の二次の行列表現として次のようなものも考えられる．基底 u_1, u_2, u_3 のうち2個は一次独立とし，かつ

$$u_1+u_2+u_3=0 \tag{15}$$

を満足するものとする．（1）（2）の置換により引き起こされる u_1, u_2, u_3 の間の変換を次のように u_1, u_2 を基底として表現する．

$$\begin{array}{lll} E\ ; u_1\to u_1 & & u_2\to u_2 \\ P\ ; u_1\to u_2 & & u_2\to u_3=-u_1-u_2 \\ P^2\ ; u_1\to u_3=-u_1-u_2 & & u_2\to u_1 \\ P_1\ ; u_1\to u_1 & & u_2\to u_3=-u_1-u_2 \\ P_2\ ; u_1\to u_3=-u_1-u_2 & & u_2\to u_2 \\ P_3\ ; u_1\to u_2 & & u_2\to u_1 \end{array} \tag{16}$$

ここで（13）の対応で基底ベクトルを対応させると上の関係は二次の行列で表現され

$$\begin{array}{lll} E''=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} & P''=\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & -1\end{bmatrix} & P_2''=\begin{bmatrix}-1 & 1\\ -1 & 0\end{bmatrix} \\ P_1''=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 0 & -1\end{bmatrix} & P_2''=\begin{bmatrix}-1 & 0\\ -1 & 1\end{bmatrix} & P_3''=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \end{array} \tag{17}$$

となる．この表現はユニタリーではない．（17）に変換

$$V=\begin{bmatrix}1 & 1\\ \sqrt{3} & -\sqrt{3}\end{bmatrix} \qquad V^{-1}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & \dfrac{1}{\sqrt{3}}\\ 1 & -\dfrac{1}{\sqrt{3}}\end{bmatrix} \tag{18}$$

を行なうと（5）の表現が得られる．

以上（5）（14）（17）の表現はすべて同値である．なお3個のスピン関数の積を基底として表現することについては問8を参照．

〔**注意**〕 有限群の一般論により任意の既約表現は正則表現を簡約することにより得られる．S_3 の場合には $E\sim P_3$ の6個の群の要素を基底ベクトルとする六次元ベクトル空間を考えその一般の要素を

$$V=v_1E+v_2P+v_3P^2+v_4P_1+v_5P_2+v_6P_3$$

と書くとこのベクトルに対する（1）の任意の要素Gによる作用

$$G : V \to V' = v_1GE + v_2GP + v_3GP^2 + v_4GP_1 + v_5GP_2 + v_6GP$$

に対しこの V' を

$$V' = v_1'E + v_2'P + v_3'P^2 + v_4'P_1 + v_5'P_2 + v_6'P_3$$

と書くとGの正則表現とは $(v_1, \cdots, v_6)^T$ を $(v_1', \cdots, v_6')^T$ に変換する6行6列の行列によりGを表現することである．たとえばPは表（2）よりVを

$$V' = v_3E + v_1P + v_2P^2 + v_5P_1 + v_6P_2 + v_4P_3$$

に変換するからPの正規表現は

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

で与えられる．このようにして（1）のすべてを6行6列の行列で表現しこれを簡約すれば一つの完全対称表現と一つの完全反対称表現と二つの同値な二次元表現が得られる．

問題X-2 〔第2版，IX-問1と同一〕

（40.11）で与えられている反対称波動関数は，関数 $v_\alpha, v_\beta, \cdots, v_\nu$ の間に一つの恒等的な一次関係が存在する場合には零になることを証明せよ．

〔解〕（40.11）[32.7] の $u_A(1, 2, \cdots, n)$ の番号をつけなおして

$$u_A(1, 2, \cdots, n) = \begin{vmatrix} v_1(1) & v_1(2) \cdots v_1(n) \\ v_2(1) & v_2(2) \cdots v_2(n) \\ \vdots & \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ v_n(1) & v_n(2) \cdots v_n(n) \end{vmatrix}$$

とする．行列式の定義より

$$u_A(1, 2, \cdots, n) = \sum_\sigma \epsilon(\sigma) v_1(\sigma(1)) v_2(\sigma(2)) \cdots v_n(\sigma(n)) \qquad (1)$$

ここでσについての和はn個の置換のすべてについてとるものとし，また $\epsilon(\sigma)$ は置換 $\sigma : (1, 2, \cdots, n) \to (\sigma(1), \sigma(2), \cdots, \sigma(n))$ が偶置換か奇置換であるかによって $+1$ または -1 をとるものとする．

いま $v_1, v_2, \cdots, v_n$ の間に

$$c_1v_1(i)+c_2v_2(i)+\cdots+c_nv_n(i)=0 \qquad (i=1, 2, \cdots, n)$$

なる関係があるとする．$c_1\neq 0$ としても一般性を失わないから，上の関係は，次のように書かれる．

$$v_1(i)=d_2v_2(i)+d_3v_3(i)+\cdots+d_nv_n(i) \qquad (d_j=-c_j/c_1)$$

このとき（1）は

$$u_A(1, 2, \cdots, n)=\sum_\sigma \epsilon(\sigma)\left(\sum_{j=2}^n d_jv_j(\sigma(1))\right)v_2(\sigma(2))\cdots v_n(\sigma(n))$$

$$=\sum_{j=2}^n d_j\left\{\sum_\sigma \epsilon(\sigma)v_j(\sigma(1))v_2(\sigma(2))\cdots v_n(\sigma(n))\right\}$$

となる．$2\leq j\leq n$ に対し

$$\sum_\sigma \epsilon(\sigma)v_j(\sigma(1))v_2(\sigma(2))\cdots v_j(\sigma(j))\cdots v_n(\sigma(n))$$

$$=\sum_\sigma \epsilon(\sigma)v_j(\sigma(j))v_2(\sigma(2))\cdots v_j(\sigma(1))\cdots v_n(\sigma(n)) \qquad (2)$$

であり σ が S_n のすべてを一度ずつ動くと

$$\sigma'=\sigma\times(1j)=\begin{pmatrix} 1 & 2\ \cdots\ j\ \cdots\ n \\ \sigma(j) & \sigma(2)\cdots\sigma(1)\cdots\sigma(n)\end{pmatrix}$$

も S_n のすべてを一度ずつ動くから

$$\sum_\sigma \epsilon(\sigma)v_j(\sigma(1))v_2(\sigma(2))\cdots v_j(\sigma(j))\cdots v_n(\sigma(n))$$

$$=\sum_{\sigma'} \epsilon(\sigma')v_j(\sigma'(1)v_2(\sigma'(2))\cdots v_j(\sigma'(j))\cdots v_n(\sigma'(n))$$

$$=\sum_\sigma \epsilon(\sigma\times(1j))v_j(\sigma(j))v_2(\sigma(2))\cdots v_j(\sigma(1))\cdots v_n(\sigma(n))$$

$$=-\sum_\sigma \epsilon(\sigma)v_j(\sigma(j))v_2(\sigma(2))\cdots v_j(\sigma(1))\cdots v_n(\sigma(n))$$

となる．ここで $\epsilon(\sigma\times(1j))=\epsilon(\sigma)\times\epsilon((1j))=-\epsilon(\sigma)$ を用いた．ここに得られた式と（2）を比較すると

$$\sum_\sigma \epsilon(\sigma)v_j(\sigma(1))v_2(\sigma(2))\cdots v_j(\sigma(j))\cdots v_n(\sigma(n))=0, \qquad 2\leq j\leq n$$

を得る．したがって

$$u_A(1, 2, \cdots, n)=0$$

が示された．

問題X-3　〔第2版，IX-問2に同一〕

ある波動関数 $u(1,2,\cdots,n)$ が対称なハミルトニアンの一つの非縮退固有値に対応するエネルギー固有関数になっている場合，この波動関数は対称か反対称のいずれかであることを証明せよ．

〔**解**〕 エネルギー固有方程式を

$$H(1,2,\cdots,n)u(1,2,\cdots,n)=Eu(1,2,\cdots,n) \tag{1}$$

とおく．

ハミルトニアンHが変数の入れ換えに対して対称であるので，Hはn個のものの置換群 S_n のユニタリー表現の任意の演算子 $U_p(P)$ と可換である．

$$[U_p(P),H]=0$$

または

$$U_p(P)H(1,2,\cdots,n)=H(1,2,\cdots,n)U_p(P) \tag{2}$$

$U_p(P)$ を波動関数 $u(1,2,\cdots,n)$ に作用させると結果は (40.4) で与えられ

$$U_p(P)u(1,2,\cdots,n)=u(P^{-1}(1,2,\cdots,n)) \tag{3}$$

である．

(1) 式の両辺に左から $U_p(P)$ を作用させると，(2) を考慮して

$$H(1,2,\cdots,n)U_p(P)u(1,2,\cdots,n)=EU_p(P)u(1,2,\cdots,n) \tag{4}$$

が得られるが，これから $u(1,2,\cdots,n)$ が対称なハミルトニアンのエネルギー固有関数で (1) を満足していれば，$U_p(P)u(1,2,\cdots,n)=u(P^{-1}(1,2,\cdots,n))$ も同じエネルギー固有値に属する固有関数であることがわかる．仮定より，縮退はないのだから，$c(P)$ をある定数として

$$U_p(P)u(1,2,\cdots,n)=c(P)u(1,2,\cdots,n) \tag{5}$$

という関係が成立するはずである．ここでPは置換群 S_n の任意の元であるが，Pとして互換をとると $c(P)=\pm 1$ となることを示そう．Pとしてn個のうちある特定の文字 i,j を入れかえる置換 σ_{ij} をとると，$(\sigma_{ij})^2=1$ であるから，(5) を考慮して

$$\begin{aligned}u(1,2,\cdots,n)&=U_p(\sigma_{ij}{}^2)u(1,2,\cdots,n)\\&=U_p(\sigma_{ij})U_p(\sigma_{ij})u(1,2,\cdots,n)\\&=U_p(\sigma_{ij})c(\sigma_{ij})u(1,2,\cdots,n)\\&=c(\sigma_{ij})U_p(\sigma_{ij})u(1,2,\cdots,n)\end{aligned}$$

$$=[c(\sigma_{ij})]^2 u(1,2,\cdots,n) \tag{6}$$

したがって，任意の i, j に関する互換 σ_{ij} に対して

$$c(\sigma_{ij})=\pm 1 \tag{7}$$

が成立する．

次にこの $c(\sigma_{ij})$ はすべて等しい，すなわち $c(\sigma_{ij})$ はすべて $+1$ であるか，またはすべて -1 であるかであることを示そう．i, j, k, l をすべて相異なる 4 文字とすれば，一般に

$$\sigma_{kl}=\sigma_{jl}\sigma_{ik}\sigma_{ij}\sigma_{ik}\sigma_{jl} \tag{8}$$

が成立する．もし ij と kl の中に等しいものがあり，たとえば $i=k$ ならば $\sigma_{ik}=1$（恒等置換）とすることにすればやはり（8）が成立する．したがって（5），（8）より

$$\begin{aligned} c(\sigma_{kl})u(1,2,\cdots,n) &= U_p(\sigma_{kl})u(1,2,\cdots,n) \\ &= U_p(\sigma_{jl}\sigma_{ik}\sigma_{ij}\sigma_{ik}\sigma_{jl})u(1,2,\cdots,n) \\ &= U_p(\sigma_{jl})U_p(\sigma_{ik})U_p(\sigma_{ij})U_p(\sigma_{ik})U_p(\sigma_{il})u(1,2,\cdots,n) \\ &= c(\sigma_{jl})c(\sigma_{ik})c(\sigma_{ij})c(\sigma_{ik})c(\sigma_{jl})u(1,2,\cdots,n) \\ &= [c(\sigma_{jl})]^2[c(\sigma_{ik})]^2 c(\sigma_{ij})u(1,2,\cdots,n) \\ &= c(\sigma_{ij})u(1,2,\cdots,n) \end{aligned} \tag{9}$$

最後の式の移行に際して（7）を使った．

これより，任意の i, j, k, l に対して

$$c(\sigma_{ij})=c(\sigma_{kl}) \tag{10}$$

が成立する．ところが（7）よりとりうる値は $+1$ かまたは -1 に限られるので，互換に対して $c(\sigma_{ij})$ はすべて $+1$ か，またはすべて -1 でなければならない．すなわち

$$c(\sigma_{ij})=1 \qquad (i\neq j,\ ij=1,2,\cdots,n)$$

または

$$c(\sigma_{ij})=-1 \qquad (i\neq j,\ ij=1,2,\cdots,n)$$

最初の場合 $u(1,2,\cdots,n)$ は対称関数であり，後の場合は反対称関数である．

問題X-4 〔第2版，IX-問3と同一〕

（41.5）[33.5] を利用して，（41.6）[33.6] に与えられているスピン波動関数が，そこに示されている固有値をもつ $(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2$ および $S_{1z}+S_{2z}$ の固

有関数になっていることを確かめよ．さらに，これらのスピン関数に全スピンの x 成分および y 成分を作用させた結果は，(27.26) [24.15] に与えられている行列の中の適当なものと一致することを示せ．

〔解〕 $\mathbf{S}_1=\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}_1$, $\mathbf{S}_2=\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}_2$ であり，$\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2$ は可換だから

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2=\tfrac{1}{4}\hbar^2(\boldsymbol{\sigma}_1{}^2+\boldsymbol{\sigma}_2{}^2+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{1}$$

$$S_{1z}+S_{2z}=\tfrac{1}{2}\hbar\,(\sigma_{1z}+\sigma_{2z}) \tag{2}$$

である．まずスピン関数の $\boldsymbol{\sigma}_1{}^2, \boldsymbol{\sigma}_2{}^2, \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 等に対する変換性をまとめておこう．スピン関数 (41.4) [33.4] に対しては本文の記号を少し変えて

$v(\frac{1}{2})=(+1)$, $v(-\frac{1}{2})=(-1)$, $v_1(\frac{1}{2})v_2(-\frac{1}{2})=(+1,-1)$ 等のような表わし方をすることにし，一般に (ϵ) と書くことにしよう．ここで ϵ は ±1 の二つの値をとる変数である．

すると (41.5) [33.5] 式の

$$\sigma_x(+)=(-)\qquad \sigma_y(+)=i(-)\qquad \sigma_z(+)=\ (+)$$

$$\sigma_x(-)=(+)\qquad \sigma_y(-)=-i(+)\qquad \sigma_z(-)=-(-)$$

という関係式は，次のようにまとめることができる．

$$\sigma_x(\epsilon)=(-\epsilon)\qquad \sigma_y(\epsilon)=i\epsilon(-\epsilon)\qquad \sigma_z(\epsilon)=\epsilon(\epsilon) \tag{3}$$

また $\sigma_x{}^2(\epsilon)=\sigma_x(-\epsilon)=(\epsilon)$, $\sigma_y{}^2(\epsilon)=\sigma_y i\epsilon(-\epsilon)=-i^2\epsilon^2(\epsilon)=(\epsilon)$, $\sigma_z{}^2(\epsilon)=\sigma_z\epsilon(\epsilon)=\epsilon^2(\epsilon)=(\epsilon)$ より

$$\boldsymbol{\sigma}^2(\epsilon)=(\sigma_x{}^2+\sigma_y{}^2+\sigma_z{}^2)(\epsilon)=3(\epsilon) \tag{4}$$

(3) より 2 体のスピン関数に対しては

$$\sigma_{1x}(\epsilon_1,\epsilon_2)=(-\epsilon_1,\epsilon_2)\qquad \sigma_{1y}(\epsilon_1,\epsilon_2)=i\epsilon_1(-\epsilon_1,\epsilon_2)\qquad \sigma_{1z}(\epsilon_1,\epsilon_2)=\epsilon_1(\epsilon_1,\epsilon_2)$$

$$\sigma_{2x}(\epsilon_1,\epsilon_2)=(\epsilon_1,-\epsilon_2)\qquad \sigma_{2y}(\epsilon_1,\epsilon_2)=i\epsilon_2(\epsilon_1,-\epsilon_2)\qquad \sigma_{2z}(\epsilon_1,\epsilon_2)=\epsilon_2(\epsilon_1,\epsilon_2)$$

が成立し，さらに

$$\left.\begin{aligned}\sigma_{1x}\sigma_{2x}(\epsilon_1,\epsilon_2)&=(-\epsilon_1,-\epsilon_2)\\ \sigma_{1y}\sigma_{2y}(\epsilon_1,\epsilon_2)&=-\epsilon_1\epsilon_2(-\epsilon_1,-\epsilon_2)\\ \sigma_{1z}\sigma_{2z}(\epsilon_1,\epsilon_2)&=\epsilon_1\epsilon_2(\epsilon_1,\epsilon_2)\end{aligned}\right\} \tag{5}$$

$$\left.\begin{aligned}(\sigma_{1x}+\sigma_{2x})(\epsilon_1,\epsilon_2)&=(-\epsilon_1,\epsilon_2)+(\epsilon_1,-\epsilon_2)\\ (\sigma_{1y}+\sigma_{2y})(\epsilon_1,\epsilon_2)&=i\epsilon_1(-\epsilon_1,\epsilon_2)+i\epsilon_2(\epsilon_1,-\epsilon_2)\\ (\sigma_{1z}+\sigma_{2z})(\epsilon_1,\epsilon_2)&=(\epsilon_1+\epsilon_2)(\epsilon_1,\epsilon_2)\end{aligned}\right\} \tag{6}$$

また（4）より

$$\boldsymbol{\sigma}_1{}^2(\epsilon_1, \epsilon_2)=3(\epsilon_1, \epsilon_2) \qquad \boldsymbol{\sigma}_2{}^2(\epsilon_1, \epsilon_2)=3(\epsilon_1, \epsilon_2) \tag{7}$$

が得られる．

これより2体スピン関数に $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ を作用させた結果は

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z}$$

であること，および（5）を使って，

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2(+,+)=\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2(1,1)=(-1,-1)-(-1,-1)+(1,1)=(1,1)=(++)$$

同様にして

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]=\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]\\
&\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2(--)=(--)\\
&\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)-(-+)]=-3\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)-(-+)]
\end{aligned} \tag{8}$$

がえられる．

さて以上の結果より（1）の $(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_2)^2$ に対しては，

$$\begin{aligned}
(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2(++)&=\frac{\hbar^2}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1{}^2+\boldsymbol{\sigma}_2{}^2+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)(++)\\
&=\frac{\hbar^2}{4}(3+3+2\times1)(++)\\
&=2\hbar^2(++)
\end{aligned} \tag{9}$$

同様にして

$$\begin{aligned}
&(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]=2\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]\\
&(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2(--)=2\hbar^2(--)\\
&(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)-(-+)]\\
&\qquad=\frac{\hbar^2}{4}(3+3+2\times(-3))\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)-(-+)]=0
\end{aligned} \tag{10}$$

また（6）より

$$(S_{1z}+S_{2z})(++)=\frac{\hbar}{2}(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})(++)=\frac{\hbar}{2}\times2(++)=\hbar(++) \tag{11}$$

同様にして

$$(S_{1z}+S_{2z})\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]=0\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]$$
$$(S_{1z}+S_{2z})(--)=-\hbar(--) \tag{12}$$
$$(S_{1z}+S_{2z})\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)-(-+)]=0\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)-(-+)]$$

である．以上の結果をまとめれば（41.6）[33.6] がえられる．

さて次に 2 体のスピン関数に $S_{1x}+S_{2x}$, $S_{1y}+S_{2y}$ を作用させた結果を（27.26）[24.15] の行列による表現と対応させてみよう．上の結果を導いたと同じ方法で

$$(S_{1x}+S_{2x})(++)=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]$$
$$(S_{1x}+S_{2x})\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}[(++)+(--)] \tag{13}$$
$$(S_{1x}+S_{2x})(--)=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]$$
$$(S_{1y}+S_{2y})(++)=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}i\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]$$
$$(S_{1y}+S_{2y})\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}i\times[-(++)+(--)] \tag{14}$$
$$(S_{1y}+S_{2y})(--)=-\frac{\hbar}{\sqrt{2}}i\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]$$

が得られる．

ここで

$$u_1=(++)\to\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}\qquad u_0=\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)+(-+)]\to\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}$$
$$u_{-1}=(--)\to\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix} \tag{15}$$

と対応させる．(13)，(14) は

$$(S_{1x}+S_{2x})u_1=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}u_0\qquad (S_{1y}+S_{2y})u_1=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}iu_0$$
$$(S_{1x}+S_{2x})u_0=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}(u_1+u_{-1})\quad (S_{1y}+S_{2y})u_0=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}i(-u_1+u_{-1}) \tag{16}$$
$$(S_{1x}+S_{2x})u_{-1}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}u_0\qquad (S_{1y}+S_{2y})u_{-1}=-\frac{\hbar}{\sqrt{2}}iu_0$$

となり，同様にして（11）（12），および（9）（10）は

$$\begin{aligned} &(S_{1z}+S_{2z})u_1 = \hbar u_1 && (\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2u_1=2\hbar^2u_1 \\ &(S_{1z}+S_{2z})u_0 = 0 && (\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2u_0=2\hbar^2u_0 \\ &(S_{1z}+S_{2z})u_{-1} = -\hbar u_{-1} && (\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2u_{-1}=2\hbar^2u_{-1} \end{aligned} \tag{17}$$

とかけるので，（15）の対応により基底ベクトルを対応させ（16）（17）を三次の行列で表現すると

$$\begin{aligned} &(S_{1x}+S_{2x}) \to \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} && (S_{1y}+S_{2y}) \to \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \\ &(S_{1z}+S_{2z}) \to \hbar\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} && (\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2 \to 2\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{18}$$

となって（27, 26）[24, 15] の $j=1$ の場合に一致するので，対応（15）のもとで u_1, u_0, u_{-1} は角運動量 $j=1$ の表現の基底をなすことがわかる．

同様にして

$$v_0=\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)-(-+)] \to [\,1\,] \tag{19}$$

で基底ベクトルを対応させると

$$\begin{aligned} &(S_{1x}+S_{2x})v_0=0 && (S_{1y}+S_{2y})v_0=0 \\ &(S_{1z}+S_{2z})v_0=0 && (\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2v_0=0 \end{aligned} \tag{20}$$

であるから，（19）の対応のもとで（20）は1行1列の0行列で表現される．これは $j=0$ の表現とみなせる．

問題X-5 〔第2版，IX-問4と同一〕

（41.9）[33.9] に与えられているスピン関数に対して問題4の計算を実行せよ．

〔**解**〕 前問の結果を利用し2体のスピン関数についての性質はそのまま使うことにする．そこで，粒子2，3については角運動量の固有状態に対して記号，$(1, m)$，$(0, 0)$ を

$$\left.\begin{aligned} &(++)=v_2(\tfrac{1}{2})v_3(\tfrac{1}{2})\equiv(1,1) \\ &\frac{1}{\sqrt{2}}\{(+-)+(-+)\}=\frac{1}{\sqrt{2}}\{v_2(\tfrac{1}{2})v_3(-\tfrac{1}{2})+v_2(-\tfrac{1}{2})v_3(\tfrac{1}{2})\}\equiv(1,0) \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

$$\left.\begin{array}{l}(--)=v_2(-\tfrac{1}{2})v_3(-\tfrac{1}{2})\equiv(1,-1)\\[4pt] \dfrac{1}{\sqrt{2}}\{(+-)-(-+)\}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\{v_2(\tfrac{1}{2})v_3(-\tfrac{1}{2})-v_2(-\tfrac{1}{2})v_3(\tfrac{1}{2})\}\equiv(0,0)\end{array}\right\}$$

のように約束する．粒子1については $v_1(\pm\frac{1}{2})=(\pm)$ と記すことにする．これらに対しては

$$\mathbf{S}_1{}^2(\pm)=\frac{3}{4}\hbar^2(\pm),\qquad S_{1x}(\pm)=\frac{\hbar}{2}(\mp),\qquad S_{1y}(\pm)=\pm\frac{\hbar}{2}i(\mp),$$

$$S_{1z}(\pm)=\pm\frac{\hbar}{2}(\pm) \tag{2}$$

および次の関係が成立する．

	$(1,1)$	$(1,0)$	$(1,-1)$	$(0,0)$
$(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2$	$2\hbar^2(1,1)$	$2\hbar^2(1,0)$	$2\hbar^2(1,-1)$	0
$(S_{2x}+S_{3x})$	$\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}(1,0)$	$\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}[(1,1)+(1,-1)]$	$\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}(1,0)$	0
$(S_{2y}+S_{3y})$	$\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}i(1,0)$	$-\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}i[(1,1)-(1,-1)]$	$-\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}i(1,0)$	0
$(S_{2z}+S_{3z})$	$\hbar(1,1)$	0	$-\hbar(1,-1)$	0

(3)

（3）および

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2=\mathbf{S}_1{}^2+(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2+2\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3) \tag{4}$$

より

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2(\pm)(1,m)=\left\{\frac{11}{4}\hbar^2+2\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)\right\}(\pm)(1,m)$$

$$(S_{1z}+S_{2z}+S_{3z})(\pm)(1,m)=\left(\pm\frac{1}{2}+m\right)\hbar(\pm)(1,m)$$

$$m=1,0,-1 \tag{5}$$

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2(\pm)(0,0)=\left\{\frac{3}{4}\hbar^2+2\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)\right\}(\pm)(0,0)$$

$$(S_{1z}+S_{2z}+S_{3z})(\pm)(0,0)=\pm\frac{1}{2}\hbar(\pm)(0,0) \tag{6}$$

が得られる．次に（5）（6）にあらわれた計算を遂行するため，$(\pm)(1,m)$，$(\pm)(0,0)$ に演算子

$$\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)=S_{1x}(S_{2x}+S_{3x})+S_{1y}(S_{2y}+S_{3y})+S_{1z}(S_{2z}+S_{3z})$$

を作用させた結果を求めておく，（2）（3）より

$$\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)(\pm)(1,1)=S_{1x}(S_{2x}+S_{3x})(\pm)(1,1)$$
$$+S_{1y}(S_{2y}+S_{3y})(\pm)(1,1)+S_{1z}(S_{2z}+S_{3z})(\pm)(1,1)$$
$$=\frac{\hbar}{2}\cdot\frac{\hbar}{\sqrt{2}}(\mp)(1,0)\pm\frac{\hbar}{2}i\cdot\frac{\hbar}{\sqrt{2}}i(\mp)(1,0)\pm\frac{\hbar}{2}\cdot\hbar(\pm)(1,1)$$
$$=\frac{1\mp1}{2\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,0)\pm\frac{1}{2}\hbar^2(\pm)(1,1) \tag{7}$$

同様にして

$$\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)(\pm)(1,0)=\frac{1\pm1}{2\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,1)+\frac{1\mp1}{2\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,-1)$$
$$\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)(\pm)(1,-1)=\frac{1\pm1}{2\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,0)\mp\frac{1}{2}\hbar^2(\pm)(1,-1) \tag{8}$$
$$\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)(\pm)(0,0)=0 \tag{9}$$

（7），（8），（9）を（5），（6）に代入することにより

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2(\pm)(1,1)=\frac{11}{4}\hbar^2(\pm)(1,1)+\frac{1\mp1}{\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,0)\pm\hbar^2(\pm)(1,1)$$
$$=\frac{11\pm4}{4}\hbar^2(\pm)(1,1)+\frac{1\mp1}{\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,0) \tag{10}$$

同様にして

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2(\pm)(1,0)$$
$$=\frac{11}{4}\hbar^2(\pm)(1,0)+\frac{1\pm1}{\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,1)+\frac{1\mp1}{\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,-1)$$
$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2(\pm)(1,-1)$$
$$=\frac{11\mp4}{4}\hbar^2(\pm)(1,-1)+\frac{1\pm1}{\sqrt{2}}\hbar^2(\mp)(1,0) \tag{11}$$
$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2(\pm)(0,0)=\frac{3}{4}\hbar^2(\pm)(0,0) \tag{12}$$

以上の結果を（41.9）[33.9] のそれぞれに適用してみよう．最初の4個に対して

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2(+++)=(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2(+)(1,1)$$
$$=\frac{15}{4}\hbar^2(+)(1,1)=\frac{15}{4}\hbar^2(+++)$$
$$(S_{1z}+S_{2z}+S_{3z})(+++)=(S_{1z}+S_{2z}+S_{3z})(+)(1,1)$$
$$=\frac{3}{2}\hbar(+)(1,1)=\frac{3}{2}\hbar(+++) \tag{13}$$

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2\frac{1}{\sqrt{3}}[(++-)+(+-+)+(-++)]$$

$$=(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}(+)(1,0)+(-)(1,1)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\,\frac{11}{4}\hbar^2(+)(1,0)+\sqrt{2}\,\frac{2}{\sqrt{2}}\hbar^2(-)(1,1)\right.$$

$$\left.+\frac{7}{4}\hbar^2(-)(1,1)+\frac{2}{\sqrt{2}}\hbar^2(+)(1,0)\right]$$

$$=\frac{15}{4}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}(+)(1,0)+(-)(1,1)]$$

$$=\frac{15}{4}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{3}}[(++-)+(+-+)+(-++)]$$

$$(S_{1z}+S_{2z}+S_{3z})\frac{1}{\sqrt{3}}[(++-)+(+-+)+(-++)]$$

$$=(S_{1z}+S_{2z}+S_{3z})\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}(+)(1,0)+(-)(1,1)]$$

$$=\frac{1}{2}\hbar\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}(+)(1,0)+(-)(1,1)]$$

$$=\frac{1}{2}\hbar\frac{1}{\sqrt{3}}[(++-)+(+-+)+(-++)] \qquad (14)$$

同じ計算を

$$\frac{1}{\sqrt{3}}[(-+-)+(--+)+(+--)]=\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}(-)(1,0)+(+)(1,-1)]$$

$$(---)=(-)(1,-1)$$

に対しても行なうことにより，これらは $(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2$ の固有値 $\frac{15}{4}\hbar^2=\frac{3}{2}\cdot\left(\frac{3}{2}+1\right)\hbar^2$ に属す四つの固有関数であることがわかるので，これらは $j=\frac{3}{2}$ の表現の基底ベクトルを構成している．

残り4個のうち，最初の2個

$$\frac{1}{\sqrt{6}}[2(-++)-(++-)-(+-+)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}[2(-)(1,1)-\sqrt{2}(+)(1,0)]$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}}[(-+-)+(--+)-2(+--)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}[\sqrt{2}(-)(1,0)-2(+)(1,-1)]$$

に対する同様の計算より，この二つは，$j=\frac{1}{2}$ の基底ベクトルをなすことがわかる．

最後の2個

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[(++-)-(+-+)]=(+)(0,0)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[(-+-)-(--+)]=(-)(0,0)$$

は（6）（12）からすぐわかるように $j=\frac{1}{2}$ の表現の基底ベクトルをなす．

問題X-6　〔第2版，IX-問6と同一〕

(41.2) [33.2] を使って，重心座標系での陽子による陽子の散乱に対する表式を導け．ただし，Coulomb 相互作用は $r=0$ の点にまで達しているものと仮定せよ．なお，この断面積の古典論的極限（$\hbar\to 0$）を，特に $\theta=90°$ の近傍で論ぜよ．また，任意に小さいがしかし有限な角領域についての平均の散乱を求める場合には，干渉項は消失することを示せ．

〔**解**〕 陽子のスピンは $\frac{1}{2}$ なので (41.2) [33.2] において $S=\frac{1}{2}$ とおけば，散乱の微分断面積は，

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2-\mathrm{Re}\,[f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \tag{1}$$

で与えられる．ここで $f(\theta)$ は (21.10) [20.10] 式

$$\left.\begin{aligned} f(\theta)&=\frac{\Gamma(1+in)}{i\Gamma(-in)}\frac{e^{-in\ln(\sin^2\frac{1}{2}\theta)}}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta} \\ n&=\frac{Me^2}{2\hbar^2k}=\frac{e^2}{\hbar v}\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

で与えられる．ただし M は陽子の質量，v は相対速度である．これより

$$\left.\begin{aligned} f(\pi-\theta)&=\frac{\Gamma(1+in)}{i\Gamma(-in)}\frac{e^{-in\ln(\cos^2\frac{1}{2}\theta)}}{2k\cos^2\frac{1}{2}\theta} \\ f^*(\pi-\theta)&=\frac{\Gamma(1-in)}{-i\Gamma(in)}\frac{e^{in\ln(\cos^2\frac{1}{2}\theta)}}{2k\cos^2\frac{1}{2}\theta}\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

であるから $\sigma(\theta)$ は

$$\sigma(\theta)=\frac{\Gamma(1+in)\Gamma(1-in)}{\Gamma(-in)\Gamma(in)}\left[\frac{1}{4k^2\sin^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{4k^2\cos^4\frac{1}{2}\theta}\right]$$
$$-\mathrm{Re}\left[\frac{\Gamma(1+in)\Gamma(1-in)}{\Gamma(-in)\Gamma(in)}\frac{e^{-in(\ln\sin^2\frac{1}{2}\theta-\ln\cos^2\frac{1}{2}\theta)}}{4k^2\sin^2\frac{1}{2}\theta\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right]$$

$$=n^2\left[\frac{1}{4k^2\sin^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{4k^2\cos^4\frac{1}{2}\theta}\right]$$

$$-n^2\frac{1}{4k^2\sin^2\frac{1}{2}\theta\cos^2\frac{1}{2}\theta}\cos\left(n\ln\frac{\sin^2\frac{1}{2}\theta}{\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right) \tag{4}$$

$n=\dfrac{e^2}{\hbar v}$，$k=\dfrac{M}{2\hbar}v$ を代入すると

$$\sigma(\theta)=\frac{e^4}{M^2v^4}\left\{\left[\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta}\right]\right.$$

$$\left.-\frac{1}{\sin^2\frac{1}{2}\theta\cos^2\frac{1}{2}\theta}\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\ln\frac{\sin^2\frac{1}{2}\theta}{\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right)\right\} \tag{5}$$

ここで古典力学への極限 $\hbar\to 0$ をとると干渉項の $\cos\left(\dfrac{e^2}{\hbar v}\ln\dfrac{\sin^2\frac{1}{2}\theta}{\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right)$ は $\ln\dfrac{\sin^2\frac{1}{2}\theta}{\cos^2\frac{1}{2}\theta}\neq 0$ つまり $\theta\neq 90°$ のときははげしく振動してその平均の値は零とみなしてよい．つまり $\theta_0\neq 90°$ のとき，ϵ を小さな正の数として

$$[\sigma(\theta_0)\sin\theta_0]_{av}\equiv\frac{1}{2\epsilon}\int_{\theta_0-\epsilon}^{\theta_0+\epsilon}\sigma(\theta)\sin\theta\,d\theta \tag{6}$$

と定義すると，これはほぼ

$$\frac{e^4}{M^2v^4}\left\{\left[\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta_0}+\frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta_0}\right]\right\}\sin\theta_0$$

$$-\frac{\sin\theta_0}{\sin^2\frac{1}{2}\theta_0\cos^2\frac{1}{2}\theta_0}\,\frac{1}{2\epsilon}\int_{\theta_0-\epsilon}^{\theta_0+\epsilon}\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}2\ln\tan\tfrac{1}{2}\theta\right)d\theta \tag{7}$$

に等しく

$$\ln\tan\tfrac{1}{2}(\theta_0+\epsilon)\approx\ln\tan\tfrac{1}{2}\theta_0+\frac{1}{\sin\theta_0}\epsilon$$

であるから，積分の項はだいたい

$$\frac{1}{2\epsilon}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\cos\left[\frac{2e^2}{\hbar v}\left(\ln\tan\tfrac{1}{2}\theta_0+\frac{1}{\sin\theta_0}\theta\right)\right]d\theta$$

$$=\cos\left(\frac{2e^2}{\hbar v}\ln\tan\tfrac{1}{2}\theta_0\right)\frac{\hbar v\sin\theta_0}{2e^2}\cdot\frac{1}{2\epsilon}2\sin\left(\frac{2e^2}{\hbar v}\,\frac{\epsilon}{\sin\theta_0}\right) \tag{8}$$

となるが，この絶対値は

$$\frac{\hbar v\sin\theta_0}{2e^2}\cdot\frac{1}{\epsilon}$$

を越えないので，ϵ を有限にしておけば $\hbar\to 0$ の極限で零となり干渉項は消える．すなわち平均をとれば古典的極限において干渉項は消える．また $\theta_0=90°$ のときは干渉

項の積分で cos の中の変数が零になる（はげしくは振動しない）ところがあるが上の議論はそのまま成り立つからやはり平均操作で干渉項は消えることがわかる.

問題X-7 〔第2版，IX-問7に同一〕

ヘリウムにおける $1s\,2p$ の配位状態は，§41［§33］の一次のオーダーでのエネルギー準位の計算に関する限りでは $1s\,2s$ の配位状態とは分離して取り扱うことができることを示せ.

〔**解**〕 ヘリウムの第一励起状態では $1s\,2s$, $1s\,2p$ 状態が零次近似ではエネルギーの縮退を起こしているので，摂動計算の第一次近似でエネルギーを求めるには，$1s\,2s$, $1s\,2p$ それぞれの一重状態，三重状態による全部で八重の縮退を考慮して，8行8列の行列から作られる固有方程式を解かねばならないことになる．しかしもし，摂動項 e^2/r_{12} の行列要素のうち $1s\,2s$ と $1s\,2p$ 間の成分が零になって

$$\left\langle 1s\,2s \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| 1s\,2p \right\rangle = 0 \qquad (1)$$

ならば，この8行8列の行列は

$$\begin{array}{c|cc:c|} & \multicolumn{2}{c}{1s\,2s} & 1s\,2p \\ 1s\,2s & J & K & \\ & K & J & 0 \\ \hdashline 1s\,2p & \multicolumn{2}{c:}{0} & * \end{array} \qquad (2)$$

という形になり，$1s\,2s$ に対する摂動と $1s\,2p$ に対する摂動とは別々に扱えることになる．ただし，J, K は (41.8) [33.8] で与えられる.

したがって，ここで（1）が成立すること，すなわち

$$\iint u_{100}^*(\mathbf{r}_1)u_{200}^*(\mathbf{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{21m}(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 = 0 \qquad m=0, \pm 1 \qquad (3)$$

および

$$\iint u_{100}^*(\mathbf{r}_1)u_{200}^*(\mathbf{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}u_{100}(\mathbf{r}_2)u_{21m}(\mathbf{r}_1)d^3r_1d^3r_2 = 0 \qquad m=0, \pm 1 \qquad (4)$$

が証明できればよい.

(16.24) [〃], (14.16) [〃] より

$$u_{100}(\mathbf{r}) = R_{10}(r) \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$u_{200}(\mathbf{r}) = R_{20}(r) \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{5}$$

$$u_{21m}(\mathbf{r}) = R_{21}(r) \cdot Y_{1m}(\theta, \varphi)$$

$$\begin{aligned} Y_{10}(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \\ Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi) &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} = \mp\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{r} \frac{x \pm iy}{\sqrt{2}} \end{aligned} \tag{6}$$

これから空間反転 $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ に対して

$$u_{100} \to u_{100}, \quad u_{200} \to u_{200}, \quad u_{21m} \to -u_{21m} \tag{7}$$

であることがわかる．一方 r_{12} は空間反転に対して変わらないことを考慮すると，(3)は $\mathbf{r}_1$ について偶関数，$\mathbf{r}_2$ について奇関数の積分であり，(4)はその逆であるので，いずれも積分は零である．

したがって $1s\,2s$ と $1s\,2p$ の摂動は別に扱えることが確かめられた．

〔**注意**〕(3)，(4)の積分が零になることは，この場合，空間反転に対する変換性，パリティ，の議論だけからだしたが，同じ結果は角部分の積分に対する考察からも結論されることはすぐ確かめられる．この問題の結論をもっと一般の場合にも適用できるようにするには，この角部分の積分を考える方法，または同じことだが全角運動量を議論することにすればよい．

§28 の

$$|m_1 m_2\rangle = |jm\rangle\langle jm|m_1 m_2\rangle \qquad |j_1 - j_2| \leqq j \leqq j_1 + j_2$$

を考慮すれば，この場合 $u_{100}u_{200}$，$u_{100}u_{21m}$ はそれぞれ全角運動量0，および1の状態である．r_{12} は空間の回転により変わらないので，e^2/r_{12} を作用しても全角運動量は変わらない．したがって，(3)，(4)はいずれも，全角運動量が0および1の状態間の積分なので直交性より零である．

問題X-8　〔第3版〕

問題**1**で求めた行列を(41.9)の同一の m 値をもつスピンの二重状態のいずれか一方に作用させて正しい対称性を与えるようにするにはどのようにす

ればよいかを示せ．

〔解〕 まず（41.9）[33.9] の $s=\frac{3}{2}$ に属する四つの関数は3個の粒子の入れ換えに対して変わらないので，これらはそれぞれが対称群 S_3 の一次の完全対称表現の基底を与える．

次に残り四つのうち $S_{1z}+S_{2z}+S_{3z}$ の等しいもの同士2個一組で，対称群の二次元表現の基底となっていることを示そう．（電子を入れ換えても $S_{1z}+S_{2z}+S_{2z}$ の値は変わらないはずだから，この値の等しいもの同士の間で入れ換わるのである）．

まず

$$
\begin{aligned}
u_1&=\frac{1}{\sqrt{6}}[2(-++)-(++-)-(+-+)]\\
u_2&=\frac{1}{\sqrt{2}}[(++-)-(+-+)]
\end{aligned}
\tag{1}
$$

とおく．

（1）に現われる3体のスピン関数

$$(-++)\quad(+-+)\quad(++-)$$

が問1の（1）（2）式の6個の置換のもとでどのような変換をするか調べておく．

$$(-++)\xrightarrow{(123)}(++-),\qquad(++-)\xrightarrow{(23)}(+-+)\quad \text{etc}$$

などの結果をスピン関数の積から作られる8個の関数のうち（+++），（−−−）以外について書くと次の通りである．

	(−++)	(+−+)	(++−)	(+−−)	(−+−)	(−−+)
E	(−++)	(+−+)	(++−)	(+−−)	(−+−)	(−−+)
P	(++−)	(−++)	(+−+)	(−−+)	(+−−)	(−+−)
P^2	(+−+)	(++−)	(−++)	(−+−)	(−−+)	(+−−)
P_1	(−++)	(++−)	(+−+)	(+−−)	(−−+)	(−+−)
P_2	(++−)	(+−+)	(−++)	(−−+)	(−+−)	(+−−)
P_3	(+−+)	(−++)	(++−)	(−+−)	(+−−)	(−−+)

（2）

この結果より

$$
(-++)\to\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}\qquad(+-+)\to\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}\qquad(++-)\to\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}
\tag{3}
$$

なる対応のもとで（$-++$），（$+-+$），（$++-$）は問1の（8）式の表現の基底を構成することがわかる．したがって（3）の対応のもとで（1）の二つの一次結合は，問1の（10）式にあらわれる二つの基底ベクトルに対応するので，これらが対称群 S_3 の二次元表現の基底をなすことは明らかであるが，念のため（1）の一次結合のうける変換性を直接示しておこう．

$$u_1=\frac{1}{\sqrt{6}}[2(-++)-(++-)-(+-+)] \qquad u_2=\frac{1}{\sqrt{2}}[(++-)-(+-+)]$$

$$E\,;\ u_1\to u_1 \qquad u_2\to u_2$$

$$P\,;\ u_1\to\frac{1}{\sqrt{6}}[2(++-)-(+-+)-(-++)] \qquad u_2\to\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-+)-(-++)]$$

$$=-\frac{1}{2}u_1+\frac{\sqrt{3}}{2}u_2 \qquad =-\frac{\sqrt{3}}{2}u_1-\frac{1}{2}u_2$$

以下同様にして

$$P^2\,;\ u_1\to-\frac{1}{2}u_1-\frac{\sqrt{3}}{2}u_2 \qquad u_2\to\frac{\sqrt{3}}{2}u_1-\frac{1}{2}u_2 \qquad (4)$$

$$P_1\,;\ u_1\to u_1 \qquad u_2\to-u_2$$

$$P_2\,;\ u_1\to-\frac{1}{2}u_1+\frac{\sqrt{3}}{2}u_2 \qquad u_2\to\frac{\sqrt{3}}{2}u_1+\frac{1}{2}u_2$$

$$P_3\,;\ u_1\to-\frac{1}{2}u_1-\frac{\sqrt{3}}{2}u_2 \qquad u_2\to-\frac{\sqrt{3}}{2}u_1+\frac{1}{2}u_2$$

これらは問1の（10）式の二つの基底が問1（8）式のもとでうける変換，または問1（13）式の対応のもとで問1（14）式に基づく変換と全く同じである．したがってここでも，

$$u_1=\frac{1}{\sqrt{6}}[2(-++)-(++-)-(+-+)]\to\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$
$$u_2=\frac{1}{\sqrt{2}}[(++-)-(+-+)]\to\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \qquad (5)$$

なる対応を与えれば，u_1, u_2 は問1（14）の対称群 S_3 の二次元表現の基底をなす．

次に残りの二つ

$$u_1'=\frac{1}{\sqrt{6}}[(-+-)+(--+)-2(+--)]$$
$$u_2'=\frac{1}{\sqrt{2}}[(-+-)-(--+)] \qquad (6)$$

についても（2）からわかるように（＋－－），（－＋－），（－－＋）は対応

$$(+--)\to\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}\qquad(-+-)\to\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}\qquad(--+)\to\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}\qquad(7)$$

のもとで問1の（8）式の表現の基底をなすことがわかるので以下（1）の u_1, u_2 と全く同様にして（6）の u_1', u_2' は（5）と同様の対応のもとで二次元表現の基底をなすことがわかる．

最後に3個のスピン関数の積から作られる合計8個のスピン関数を基底として作られる対称群 S_3 の八次元表現にふれておく．

（＋＋＋），（－＋＋），（＋－＋），（＋＋－），（＋－－），（－＋－），（－－＋），（－－－）を順に $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \cdots, \mathbf{e}_8$ とし，$\mathbf{e}_i$ に対して

$$\mathbf{e}_i\to\begin{bmatrix}0\\\vdots\\1\\\vdots\\0\end{bmatrix}(i$$

なる基底ベクトルを対応させ，（2）から得られる変換をこのベクトルを基底として表現すれば対称群 S_3 の8行8列の行列表現が得られる．この表現空間は，直ちにわかるとおり $\{\mathbf{e}_1\}$，$\{\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_4\}$，$\{\mathbf{e}_5, \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_7\}$，$\{\mathbf{e}_8\}$ の四つの部分空間に分れる．$\mathbf{e}_1$ および $\mathbf{e}_8$ はそれぞれ一次元の恒等表現の基底をなす．残り2組の三次元表現は問1の（8）式と全く同じであるので，さらに簡約してそれぞれから一次の恒等表現と二次の行列表現を一つずつ得る．こうして S_3 の8次の行列表現を簡約して4組の一次元恒等表現および2組の二次元表現を得る．これらの基底が（41.9）[33.9] にあらわれている8組の一次結合である．三個またはそれ以上の $S=\frac{1}{2}$ のスピン関数の積からは完全反対称表現を作ることはできない．理由は，一次元の完全反対称表現の基底は（40.11）[32.7] で与えられるが，一方スピン関数で独立なものは2個しかないので，3列目およびそれ以下にわたってすべて独立にすることができず，したがって問2の結論より，この基底は恒等的に零となってしまうからである．

問題X-9　〔第2版，IX-問8と同一〕

もしもヘリウム原子の各電子がスピン角運動量 $\hbar$ をもち，Einstein-Bose

の統計に従うものとすれば，ヘリウムの非摂動基底状態の波動関数はどうなるか．

〔**解**〕 ヘリウムの摂動を受けていない基底状態における電子の空間部分の状態はともに u_{100} である．したがって，全体の波動関数の空間部分は2個の電子の入れ換えに対して対称である．今電子が Einstein-Bose 統計に従うものとすれば，全体の波動関数は2個の電子の入れ換えに対して対称でなければならないのだから，スピン部分の波動関数は，2個の電子の入れ換えに対して対称でなければならない．

スピン $\hbar(j=1)$ の一体の電子の波動関数を

$$v(m) \qquad m=0,\pm 1$$
$$\mathbf{S}^2 v(m)=2\hbar^2 v(m) \tag{1}$$
$$S_z v(m)=m\hbar v(m)$$

とおき，電子1，2のスピン部分の波動関数の積に対して§41 [§33] と同じようにして

$$v_1(+1)v_2(+1)=(++)$$
$$v_1(+1)v_2(0) \quad =(+0) \quad 等$$

と略記することにすれば，$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2$，$S_{1z}+S_{2z}$ の固有関数は (28,1) および Clebsch-Gordan 係数 (28,14) を使えば求まる．たとえば $j=2$，$m=2$ なら

$$|22\rangle=|m_1m_2\rangle\langle 1m_11m_2|2211\rangle$$
$$=|11\rangle\langle 1111|2211\rangle=|11\rangle=(++)$$

$j=2$，$m=0$ なら

$$|20\rangle=|m_1m_2\rangle\langle 1m_11m_2|2011\rangle$$
$$=|1-1\rangle\langle 111-1|2011\rangle+|00\rangle\langle 1010|2011\rangle+|-11\rangle\langle 1-111|2011\rangle$$
$$=\sqrt{\frac{1}{6}}|1-1\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|00\rangle+\sqrt{\frac{1}{6}}|-11\rangle$$
$$=\sqrt{\frac{1}{6}}[(+-)+2(00)+(-+)]$$

これらの結果をまとめると次の通りである．

	$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2$	$S_{1z}+S_{2z}$
$(++)$	$6\hbar^2$	$2\hbar$
$\frac{1}{\sqrt{2}}[(+0)+(0+)]$	$6\hbar^2$	$1\hbar$

$\frac{1}{\sqrt{6}}[(+-)+2(0\ 0)+(-+)]$	$6\hbar^2$	0	
$\frac{1}{\sqrt{2}}[(0\ -)+(-\ 0)]$	$6\hbar^2$	$-\hbar$	
$(--)$	$6\hbar^2$	$-2\hbar$	(2)
$\frac{1}{\sqrt{2}}[(+\ 0)-(0\ +)]$	$2\hbar^2$	$\hbar$	
$\frac{1}{\sqrt{2}}[(+-)-(-+)]$	$2\hbar^2$	0	
$\frac{1}{\sqrt{2}}[(0\ -)-(-\ 0)]$	$2\hbar^2$	$-\hbar$	
$\frac{1}{\sqrt{3}}[(+-)-(0\ 0)+(-+)]$	0	0	

これより $s=2$（5重項），$s=1$（3重項），$s=0$（1重項）の3種が現われるが，$s=1$ は電子の入れ換えに対して反対称なので，基底状態で許されるのは $s=2,0$ である．摂動がなければエネルギーはスピンによらぬので，基底状態は全部で6重に縮退している．

問題X-10 〔第2版，IX-問9と同一〕

中性リチウム原子に対する非摂動の基底状態波動関数を書け．

[解] 中性リチウム原子では，陽子3個中性子4個からなる原子核のまわりを3個の電子が廻っている．摂動がない時，もし3個の電子がすべて $1s$ 状態すなわち u_{100} の状態を占めることができれば，これが基底状態となる．しかしこの場合空間部分の波動関数は，3個の電子の入れ換えに対して完全対称であるのに反して，3個のスピン部分の波動関数の積より完全反対称な状態は作れないので（問題X―8，2参照），全体として完全反対称な波動関数が構成されない．したがって摂動のない場合の基底状態は $(1s)^2 2s$ または $(1s)^2 2p$ で与えられる．

それぞれの電子の空間部分とスピン部分とを合わせた波動関数で現われうるものは

$$(1s)^2 2s \text{ では} \quad u_{100}(\mathbf{r})v(\tfrac{1}{2}), \quad u_{100}(\mathbf{r})v(-\tfrac{1}{2}), \quad u_{200}(\mathbf{r})v(m) \quad m=\pm\tfrac{1}{2} \qquad (1)$$

$$(1s)^2 2p \text{ では} \quad u_{100}(\mathbf{r})v(\tfrac{1}{2}), \quad u_{100}(\mathbf{r})v(-\tfrac{1}{2}), \quad u_{21M}(\mathbf{r})v(m) \quad M=0,\pm1, \quad m=\pm\tfrac{1}{2} \qquad (2)$$

である．ここでは $(1s)^2 2s$ で話を進めることにしよう．

（40.11）［32.7］より3個の電子の入れ換えに対して完全反対称な波動関数は，規格化も考慮して

$$\psi(1,2,3)=\frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} u_{100}(\mathbf{r}_1)v_1(\frac{1}{2}) & u_{100}(\mathbf{r}_2)v_2(\frac{1}{2}) & u_{100}(\mathbf{r}_3)v_3(\frac{1}{2}) \\ u_{100}(\mathbf{r}_1)v_1(-\frac{1}{2}) & u_{100}(\mathbf{r}_2)v_2(-\frac{1}{2}) & u_{100}(\mathbf{r}_3)v_3(-\frac{1}{2}) \\ u_{200}(\mathbf{r}_1)v_1(m) & u_{200}(\mathbf{r}_2)v_2(m) & u_{200}(\mathbf{r}_3)v_3(m) \end{vmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}\{u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{100}(\mathbf{r}_2)u_{200}(\mathbf{r}_3)v_3(m)[v_1(\tfrac{1}{2})v_2(-\tfrac{1}{2})-v_1(-\tfrac{1}{2})v_2(\tfrac{1}{2})]$$
$$+u_{100}(\mathbf{r}_2)u_{100}(\mathbf{r}_3)u_{200}(\mathbf{r}_1)v_1(m)[v_2(\tfrac{1}{2})v_3(-\tfrac{1}{2})-v_2(-\tfrac{1}{2})v_3(\tfrac{1}{2})]$$
$$+u_{100}(\mathbf{r}_3)u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{200}(\mathbf{r}_2)v_2(m)[v_3(\tfrac{1}{2})v_1(-\tfrac{1}{2})-v_3(-\tfrac{1}{2})v_1(\tfrac{1}{2})]\} \tag{3}$$

となる．［　］内は2体のスピン波動関数の反対称な組み合せであるから合成スピンは0，それにスピン $s=\frac{1}{2}$ の関数がかかっているから，結局全スピンは $s=\frac{1}{2}$ である．この事情をもっとはっきりみるため $\psi(1,2,3)$ の式を少し変形してみる．ここでスピン部分，空間部分の波動関数について

$$v_1(\tfrac{1}{2})v_2(-\tfrac{1}{2})v_3(\tfrac{1}{2})=(+-+),\qquad v_1(\tfrac{1}{2})v_2(-\tfrac{1}{2})v_3(m)=(+-m)\ \text{etc.}$$
$$u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{100}(\mathbf{r}_2)u_{200}(\mathbf{r}_3)=(112),\quad u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{200}(\mathbf{r}_2)u_{100}(\mathbf{r}_3)=(121)\ \text{etc.}$$

なる略号を用いることにする．すると $m=\frac{1}{2}$ のとき（3）は

$$\psi(1,2,3)=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{\frac{1}{\sqrt{6}}[2(211)-(121)-(112)]\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(++-)-(+-+)]$$
$$-\frac{1}{\sqrt{2}}[(112)-(121)]$$
$$\times\frac{1}{\sqrt{6}}[2(-++)-(++-)-(+-+)]\Big\}$$

となり $m=-\frac{1}{2}$ のときは

$$\psi(1,2,3)=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{\frac{1}{\sqrt{6}}[2(211)-(121)-(112)]\times\frac{1}{\sqrt{2}}[(-+-)-(--+)]$$
$$-\frac{1}{\sqrt{2}}[(112)-(121)]$$
$$\times\frac{1}{\sqrt{6}}[(-+-)+(--+)-2(+--)]\Big\} \tag{4}$$

となる．

この形からわかるように，空間部分，スピン関数それぞれが対称群の二次元表現の基底の形をしており，全体として完全反対称である．スピン部分の関数は完全反対称にできないので，完全対称な空間部分の関数はあらわれないが，スピン部分が完全対称，空間部分完全反対称の形の積もあらわれない．それは u_{100} が２度あらわれるので完全反対称の形の積が作れないからである．さて空間部分は角運動量０，スピン部分は（41.9）[33.9] の $s=\frac{1}{2}$ に属す基底だから全体の角運動量は $\frac{1}{2}\hbar$ であり２重に縮退している．

$(1s)^2 2p$ に対する関数は（３）で $u_{200}\rightarrow u_{21M}$ と置き換えることにより得られる．無摂動状態では $(1s)^2 2s$, $(1s)^2 2p$ 共に同じエネルギー状態であるが，実際のリチウム中性原子の基底状態は $(1s)^2 2s$ で与えられる．これは主に電子間のクーロン相互作用を考慮すると理解できる．$2s$ または $2p$ 軌道の電子に対して，$1s$ 軌道の２電子は原子核によるクーロン場を遮蔽する作用をする．この遮蔽されたクーロン場は r の大きなところでは急速に減少するので，比較的外側を廻る $2p$ 軌道の電子より $2s$ 軌道の電子に対する作用が大きくきいて $2p$ 状態に比べて $2s$ 状態のエネルギーを低くすると考えられる．

問題X-11　〔第３版〕

座標表示を使って，（42.3）の第２式の正しいこと，すなわち $\mathrm{tr}(P_\alpha)=1$ を確かめよ．

［解］　規格化された状態 $|\alpha\rangle$ を座標表示したものを $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ とする．

$$\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle=\psi_\alpha(\mathbf{r}) \tag{1}$$

$$\int\psi_\alpha{}^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r})d^3r=\int|\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 d^3r=1 \tag{2}$$

また任意の規格完全直交系を $\phi_j(\mathbf{r})=\langle\mathbf{r}|j\rangle$ $(j=1,2,\cdots)$ とすると

$$\int\phi_i{}^*(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}=\delta_{ij}\qquad(i,j=1,2,\cdots) \tag{3}$$

が成立する．また $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ を $\phi_j(\mathbf{r})$ で展開して，

$$\psi_\alpha(\mathbf{r})=\sum_j c_j\phi_j(\mathbf{r}) \tag{4}$$

となったとすれば（２）（３）より，

$$1=\int|\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r}=\sum_{i,j}c_i{}^*c_j\int\phi_i{}^*(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$

$$= \sum_{i,j} c_i^* c_j \delta_{ij}$$

$$= \sum_i |c_i|^2 \qquad (5)$$

が成立する．

さて $\mathrm{tr}\,(P_\alpha)$ を座標表示で求めると

$$\mathrm{tr}\,(P_\alpha) = \sum_j \langle j|\alpha\rangle\langle\alpha|j\rangle$$

$$= \sum_j |\langle j|\alpha\rangle|^2$$

$$= \sum_j \left|\int d^3r \langle j|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle\right|^2$$

$$= \sum_j \left|\int d^3r\, \phi_j^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r})\right|^2 \qquad (6)$$

二行目から三行目に移るとき，(23.18′) を使った．ただしここでは規格完全直交系についての和 $\int d^3r$ を省略せずに書いておいた．

$\psi_\alpha(\mathbf{r})$ に対する展開式（4），および（3），（5）を考慮すると（6）はさらに

$$\mathrm{tr}\,(P_\alpha) = \sum_j \left|\sum_i c_i \int \phi_j^*(\mathbf{r})\phi_i(\mathbf{r}) d^3r\right|^2$$

$$= \sum_j |\sum_i c_i \delta_{ij}|^2$$

$$= \sum_j |c_j|^2 = 1$$

となるから

$$\mathrm{tr}\,(P_\alpha) = 1$$

が得られる．

なお P_α を座標表示に移すと

$$P_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle\mathbf{r}|\alpha\rangle\langle\alpha|\mathbf{r}'\rangle = \psi_\alpha(\mathbf{r})\psi_\alpha^*(\mathbf{r}')$$

となるので，これを使うと

$$\mathrm{tr}\,(P_\alpha) = \int P_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}) d^3r = \int |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1$$

となって同じ結果を得ることができる．

問題 X-12　〔第 3 版〕

第 7 章問題 **9** の答えを利用して，状態 $v(\frac{1}{2})$ を極角座標が $\theta_\alpha, \phi_\alpha$ の偏りの

ベクトル $\boldsymbol{\pi}_\alpha$ をもつ状態 $|\alpha>$ へ回転するユニタリー行列を求めよ．さらに (42.15) と (42.17) とから計算された P_α が互いに一致することを示せ．

〔解〕 まず $v(\frac{1}{2})$に対して (42.18) を計算してみよう．

$$v(\tfrac{1}{2})=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

であるから $\boldsymbol{\sigma}$ として (41.3) を使うと，

$$\begin{aligned}&[1\quad 0]\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=0\\&[1\quad 0]\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=0\\&[1\quad 0]\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=1\end{aligned}\qquad(1)$$

したがって，$v(\frac{1}{2})$ に対する分極ベクトルは (0, 0, 1) であり，z 軸正方向を向いている．さて分極ベクトル $\boldsymbol{\pi}_\alpha$ は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\pi}_\alpha&=(\pi_{\alpha x},\pi_{\alpha y},\pi_{\alpha z})\\&=(\sin\theta_\alpha\cos\phi_\alpha,\sin\theta_\alpha\sin\phi_\alpha,\cos\theta_\alpha)\end{aligned}\qquad(2)$$

と表わされる．ベクトル(0, 0, 1)を回転により $\boldsymbol{\pi}_\alpha$ に一致させるためには，回転軸は，xy 平面内にあり，しかも z 軸および $\boldsymbol{\pi}$ を含む面に垂直な方向にとらねばならぬ．(図参照)

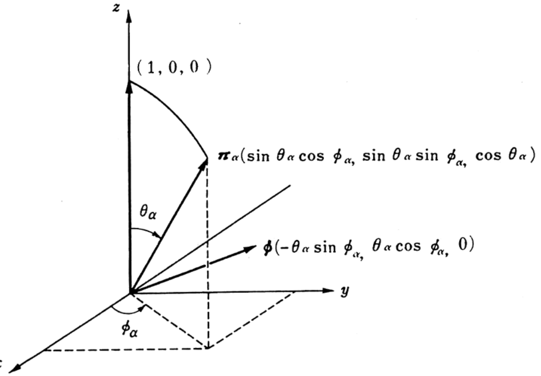


図 22

この軸のまわりに θ_α 回転すれば，(0, 0, 1) は $\boldsymbol{\pi}_\alpha$ に一致する．この回転を表わすベクトルを問題VII-9と同じように $\boldsymbol{\phi}$ と記すと，$\boldsymbol{\phi}$ は大きさ θ_α のベクトルで

$$\boldsymbol{\phi}=\left(\theta_\alpha \sin\frac{\pi}{2}\cos\left(\phi_\alpha+\frac{\pi}{2}\right),\ \theta_\alpha \sin\frac{\pi}{2}\sin\left(\phi_\alpha+\frac{\pi}{2}\right),\ \theta_\alpha\cos\frac{\pi}{2}\right)$$
$$=(-\theta_\alpha \sin\phi_\alpha,\ \theta_\alpha\cos\phi_\alpha,\ 0) \tag{3}$$

で与えられる．

したがってこの回転に対応する変換 $U_R(\boldsymbol{\phi})$ は，問題VII-9の式（1）において

$$\phi\to\theta_\alpha,\quad \theta\to\frac{\pi}{2},\quad \varphi\to\phi_\alpha+\frac{\pi}{2}$$

と置くことにより

$$U_R(\boldsymbol{\phi})=\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta_\alpha}{2} & -e^{-i\phi_\alpha}\sin\dfrac{\theta_\alpha}{2}\\ +e^{i\phi_\alpha}\sin\dfrac{\theta_\alpha}{2} & \cos\dfrac{\theta_\alpha}{2}\end{bmatrix} \tag{4}$$

となる．[注]

$v(\frac{1}{2})$ にこの $U_R(\boldsymbol{\phi})$ を作用させると $|\alpha\rangle$ が得られ，

$$|\alpha\rangle=\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta_\alpha}{2} & -e^{-i\phi_\alpha}\sin\dfrac{\theta_\alpha}{2}\\ e^{i\phi_\alpha}\sin\dfrac{\theta_\alpha}{2} & \cos\dfrac{\theta_\alpha}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta_\alpha}{2}\\ e^{i\phi_\alpha}\sin\dfrac{\theta_\alpha}{2}\end{bmatrix} \tag{5}$$

で与えられる．この $|\alpha\rangle$ が分極ベクトル $\boldsymbol{\pi}_\alpha$ を与えることはすぐ確かめられる．すなわち（1）と同じようにして

$$\langle\alpha|\sigma_x|\alpha\rangle=[\alpha_1^*, \alpha_2^*]\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=\alpha_1^*\alpha_2+\alpha_2^*\alpha_1$$
$$=\cos\frac{\theta_\alpha}{2}\cdot e^{i\phi_\alpha}\sin\frac{\theta_\alpha}{2}+e^{-i\phi_\alpha}\sin\frac{\theta_\alpha}{2}\cos\frac{\theta_\alpha}{2}$$
$$=\sin\theta_\alpha\cos\phi_\alpha \tag{6}$$

同様にして

$$\langle\alpha|\sigma_y|\alpha\rangle=\sin\theta_\alpha\sin\phi_\alpha$$
$$\langle\alpha|\sigma_z|\alpha\rangle=\cos\theta_\alpha$$

が得られるので，確かに

$$\langle\alpha|\boldsymbol{\sigma}|\alpha\rangle=(\sin\theta_\alpha\cos\phi_\alpha, \sin\theta_\alpha\sin\phi_\alpha, \cos\theta_\alpha)=\boldsymbol{\pi}_\alpha$$

である．また当然だが $\langle\alpha|\alpha\rangle=1$ が成立していることも確かめられる．

さてこの $|\alpha\rangle$ より (42.15) にしたがって P_α を作り，それが (42.17) の表示と一致することを確かめよう．

$$P_\alpha=\begin{bmatrix}|\alpha_1|^2 & \alpha_1\alpha_2^* \\ \alpha_2\alpha_1^* & |\alpha_2|^2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos^2\dfrac{\theta_\alpha}{2} & e^{-i\phi_\alpha}\cos\dfrac{\theta_\alpha}{2}\sin\dfrac{\theta_\alpha}{2} \\ e^{i\phi_\alpha}\cos\dfrac{\theta_\alpha}{2}\sin\dfrac{\theta_\alpha}{2} & \sin^2\dfrac{\theta_\alpha}{2}\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1+\cos\theta_\alpha & \sin\theta_\alpha\cos\phi_\alpha-i\sin\theta_\alpha\sin\phi_\alpha \\ \sin\theta_\alpha\cos\phi_\alpha+i\sin\theta_\alpha\sin\phi_\alpha & 1-\cos\theta_\alpha\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1+\pi_{\alpha z} & \pi_{\alpha x}-i\pi_{\alpha y} \\ \pi_{\alpha x}+i\pi_{\alpha y} & 1-\pi_{\alpha z}\end{bmatrix}$$

〔**注意**〕（5）で与えられる $|\alpha\rangle$ に絶対値1の任意の数をかけたものもやはり $|\alpha\rangle$ としての条件をそなえている．したがって $|\alpha\rangle$ を与える変換の一般形は（4）に絶対値1の任意の数をかけたもので与えられる．

問題X-13 〔第3版〕

スピン $\frac{1}{2}$ 粒子の2個の純粋状態が直交しているならば，これらの状態に対する偏りのベクトルは大きさ等しく方向反対になることを証明せよ．

〔**解**〕 規格化された純粋状態 $|\alpha\rangle$ を

$$|\alpha\rangle=\begin{bmatrix}\alpha_1 \\ \alpha_2\end{bmatrix} \qquad |\alpha_1|^2+|\alpha_2|^2=1$$

ととれば，これに直交する状態 $|\beta\rangle$ は，絶対値1の定数の不定性を除いて，一意的に定まり

$$|\beta\rangle=\begin{bmatrix}-\alpha_2^* \\ \alpha_1^*\end{bmatrix}$$

で与えられる．分極ベクトルは (42.18) で与えられ，

$$\boldsymbol{\pi}_\alpha=\langle\alpha|\boldsymbol{\sigma}|\alpha\rangle$$

である．これより

$$\pi_{\alpha x}=\langle\alpha|\sigma_x|\alpha\rangle=[\alpha_1^*\alpha_2^*]\begin{bmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1 \\ \alpha_2\end{bmatrix}=\alpha_1\alpha_2^*+\alpha_2\alpha_1^*$$

$$\pi_{\alpha y}=\langle\alpha|\sigma_y|\alpha\rangle=[\alpha_1{}^*\alpha_2{}^*]\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=i(\alpha_1\alpha_2{}^*-\alpha_2\alpha_1{}^*)$$

$$\pi_{\alpha z}=\langle\alpha|\sigma_z|\alpha\rangle=[\alpha_1{}^*\alpha_2{}^*]\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=\alpha_1\alpha_1{}^*-\alpha_2\alpha_2{}^*$$

したがって

$$\boldsymbol{\pi}_\alpha=(\alpha_1\alpha_2{}^*+\alpha_2\alpha_1{}^*,\ i(\alpha_1\alpha_2{}^*-\alpha_2\alpha_1{}^*),\ \alpha_1\alpha_1{}^*-\alpha_2\alpha_2{}^*)$$

同様にして $|\beta\rangle$ に対応する分極ベクトルを求めると,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\pi}_\beta&=\langle\beta|\boldsymbol{\sigma}|\beta\rangle\\ &=(-\alpha_2{}^*\alpha_1-\alpha_1{}^*\alpha_2,\ i(-\alpha_2{}^*\alpha_1+\alpha_1{}^*\alpha_2),\ \alpha_2{}^*\alpha_2-\alpha_1{}^*\alpha_1)\\ &=-\boldsymbol{\pi}_\alpha\end{aligned}$$

となる．したがって直交する二つのスピン状態に対応する分極ベクトルは，同じ大きさで逆向きである．

〔別解〕

$$|\beta\rangle=\begin{bmatrix}-\alpha_2{}^*\\ \alpha_1{}^*\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1{}^*\\ \alpha_2{}^*\end{bmatrix}=-i\sigma_y\begin{bmatrix}\alpha_1{}^*\\ \alpha_2{}^*\end{bmatrix}$$

より

$$\begin{aligned}\langle\beta|\boldsymbol{\sigma}|\beta\rangle&=[\alpha_1,\alpha_2]i\sigma_y\boldsymbol{\sigma}(-i\sigma_y)\begin{bmatrix}\alpha_1{}^*\\ \alpha_2{}^*\end{bmatrix}\\ &=[\alpha_1{}^*,\alpha_2{}^*](\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\sigma_y)^T\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=\langle\alpha|(\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\sigma_y)^T|\alpha\rangle\end{aligned}$$

となるから

$$\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\sigma_y=-\boldsymbol{\sigma}^T$$

を示せばよい．これは Pauli 行列についてのよく知られた性質で $\boldsymbol{\sigma}$ の具体的な形から直ちに証明できる．

問題 X-14　〔第3版〕

スピン s 粒子に対する $\boldsymbol{\sigma}$ の直交する任意の2個の成分の積の跡(トレース)は零になることを証明せよ．

〔解〕 スピン s に対する角運動量演算子 $\mathbf{J}$ は $(2s+1)$ 次の正方行列で，その交換関係

は (27.15) で与えられ

$$\mathbf{J}\times\mathbf{J}=i\hbar\mathbf{J} \tag{1}$$

であり，これより $\boldsymbol{\sigma}=\dfrac{1}{s\hbar}\mathbf{J}$ に対する交換関係 (42.29) が得られる

$$\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\sigma}=\frac{i}{s}\boldsymbol{\sigma} \tag{2}$$

（2）を成分でかけば

$$\begin{aligned}\sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x&=\frac{i}{s}\sigma_z\\ \sigma_y\sigma_z-\sigma_z\sigma_y&=\frac{i}{s}\sigma_x\\ \sigma_z\sigma_x-\sigma_x\sigma_z&=\frac{i}{s}\sigma_y\end{aligned} \tag{3}$$

また $\mathbf{J}^2=s(s+1)\hbar^2\mathbf{1}$（ここで $\mathbf{1}$ は $2s+1$ 次の単位行列）より

$$\boldsymbol{\sigma}^2=\sigma_x{}^2+\sigma_y{}^2+\sigma_z{}^2=\frac{s+1}{s}\mathbf{1} \tag{4}$$

が成立する．

（3）より

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\,(\mathbf{1}\sigma_z)&=\mathrm{tr}\,(\sigma_z)\\ &=\mathrm{tr}\,\frac{s}{i}[\sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x]\\ &=\frac{s}{i}[\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_y)-\mathrm{tr}\,(\sigma_y\sigma_x)]\\ &=\frac{s}{i}[\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_y)-\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_y)]\\ &=0\end{aligned} \tag{5}$$

ここで tr に関する性質

$$\begin{aligned}&\mathrm{tr}\,(aA)=a\,\mathrm{tr}\,A\\ &\mathrm{tr}\,(A+B)=\mathrm{tr}\,A+\mathrm{tr}\,B\\ &\mathrm{tr}\,(AB)=\mathrm{tr}\,(BA)\end{aligned} \tag{6}$$

を使った．

同様にして

$$\mathrm{tr}\,(\mathbf{1}\sigma_x)=\mathrm{tr}\,(\sigma_x)=0,\qquad \mathrm{tr}\,(\mathbf{1}\sigma_y)=\mathrm{tr}\,(\sigma_y)=0 \tag{7}$$

また

$$\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_y)=\mathrm{tr}\left[\sigma_x\frac{s}{i}(\sigma_z\sigma_x-\sigma_x\sigma_z)\right]$$

$$=\frac{s}{i}[\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_z\sigma_x)-\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_x\sigma_z)]$$

$$=\frac{s}{i}[\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_z\sigma_x)-\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_z\sigma_x)]$$

$$=0 \tag{8}$$

ここでも（6）を使った.

同様にして

$$\mathrm{tr}\,(\sigma_y\sigma_z)=\mathrm{tr}\,(\sigma_z\sigma_x)=0 \tag{9}$$

以上より $1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ のうちの異なる二つの積の tr は零であることがいえた.

問題 X-15 〔第3版〕

スピン s 粒子に対する $\boldsymbol{\sigma}$ の任意の成分の2乗の跡の値を求めよ.

〔解〕 前問（3）式と tr の性質を使って

$$\mathrm{tr}\,(\sigma_x{}^2)=\mathrm{tr}\left[\sigma_x\frac{s}{i}(\sigma_y\sigma_z-\sigma_z\sigma_y)\right]$$

$$=\frac{s}{i}[\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_y\sigma_z)-\mathrm{tr}\,(\sigma_x\sigma_z\sigma_y)]$$

$$=\frac{s}{i}[\mathrm{tr}\,(\sigma_y\sigma_z\sigma_x)-\mathrm{tr}\,(\sigma_y\sigma_x\sigma_z)]$$

$$=\mathrm{tr}\left[\sigma_y\frac{s}{i}(\sigma_z\sigma_x-\sigma_x\sigma_z)\right]$$

$$=\mathrm{tr}\,(\sigma_y{}^2)$$

$$=\frac{s}{i}[\mathrm{tr}\,(\sigma_z\sigma_x\sigma_y)-\mathrm{tr}\,(\sigma_z\sigma_y\sigma_x)]$$

$$=\mathrm{tr}\left[\sigma_z\frac{s}{i}(\sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x)\right]$$

$$=\mathrm{tr}\,(\sigma_z{}^2)$$

ゆえに

$$\mathrm{tr}\,(\sigma_x{}^2)=\mathrm{tr}\,(\sigma_y{}^2)=\mathrm{tr}\,(\sigma_z{}^2) \tag{1}$$

また前問（4）式より

$$\mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\sigma}^2)=\mathrm{tr}\,(\sigma_x{}^2)+\mathrm{tr}\,(\sigma_y{}^2)+\mathrm{tr}\,(\sigma_z{}^2)$$

$$=\mathrm{tr}\left(\frac{s+1}{s}\mathbf{1}\right)$$

$$=\frac{s+1}{s}\mathrm{tr}\,(\mathbf{1})$$

$$=\frac{(s+1)(2s+1)}{s} \qquad (2)$$

（1）（2）より

$$\mathrm{tr}\,(\sigma_x{}^2)=\mathrm{tr}\,(\sigma_y{}^2)=\mathrm{tr}\,(\sigma_z{}^2)=\frac{(s+1)(2s+1)}{3s} \qquad (3)$$

が得られる．

問題X-16 〔第3版〕

スピン1粒子の任意の純粋状態に対する偏りのベクトルを具体的に計算して，このベクトルの長さは1以下かまたは1に等しいことを示せ．なお，この長さが1に等しくなる状態に課せられる条件を求めよ．

〔**解**〕 $s=1$ だから $\boldsymbol{\sigma}=\frac{1}{\hbar}\mathbf{J}$ である．（27.26）で $j=1$ に対する $\mathbf{J}$ の表示より

$$\sigma_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix} \quad \sigma_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{bmatrix} \quad \sigma_z=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix} \qquad (1)$$

である．

いま純粋状態を

$$|\alpha\rangle=\begin{bmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\\\alpha_3\end{bmatrix} \qquad |\alpha_1|^2+|\alpha_2|^2+|\alpha_3|^2=1 \qquad (2)$$

とおくと，（42.18）より

$$\pi_{\alpha x}=\langle\alpha|\sigma_x|\alpha\rangle$$

$$=[\alpha_1{}^*\alpha_2{}^*\alpha_3{}^*]\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\\\alpha_3\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_1{}^*\alpha_2{}^*\alpha_3{}^*]\begin{bmatrix}\alpha_2\\\alpha_1+\alpha_3\\\alpha_2\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\alpha_2{}^*+\alpha_1{}^*\alpha_2+\alpha_2\alpha_3{}^*+\alpha_2{}^*\alpha_3)$$

$$=\sqrt{2}\,\mathrm{Re}\,(\alpha_1\alpha_2{}^*+\alpha_2\alpha_3{}^*) \tag{3}$$

同様にして

$$\pi_{\alpha y}=\langle\alpha|\sigma_y|\alpha\rangle$$

$$=\frac{i}{\sqrt{2}}(\alpha_1\alpha_2{}^*-\alpha_1{}^*\alpha_2+\alpha_2\alpha_3{}^*-\alpha_2{}^*\alpha_3)$$

$$=-\sqrt{2}\,\mathrm{Im}\,(\alpha_1\alpha_2{}^*+\alpha_2\alpha_3{}^*)$$

$$\pi_{\alpha z}=\langle\alpha|\sigma_z|\alpha\rangle$$

$$=\alpha_1\alpha_1{}^*-\alpha_3\alpha_3{}^*$$

$$=|\alpha_1|^2-|\alpha_3|^2 \tag{4}$$

が得られる．これより

$$\boldsymbol{\pi}_\alpha{}^2=\pi_{\alpha x}{}^2+\pi_{\alpha y}{}^2+\pi_{\alpha z}{}^2$$

$$=2\{\mathrm{Re}\,(\alpha_1\alpha_2{}^*+\alpha_2\alpha_3{}^*)\}^2+2\{\mathrm{Im}\,(\alpha_1\alpha_2{}^*+\alpha_2\alpha_3{}^*)\}^2$$

$$+(|\alpha_1|^2-|\alpha_3|^2)^2$$

$$=2|\alpha_1\alpha_2{}^*+\alpha_2\alpha_3{}^*|^2+(|\alpha_1|^2-|\alpha_3|^2)^2$$

$$\leqq 2(|\alpha_1\alpha_2{}^*|+|\alpha_2\alpha_3{}^*|)^2+(|\alpha_1|^2-|\alpha_3|^2)^2$$

$$=2|\alpha_2|^2(|\alpha_1|+|\alpha_3|)^2+(|\alpha_1|^2-|\alpha_3|^2)^2$$

$$=(|\alpha_1|+|\alpha_3|)^2\{2|\alpha_2|^2+(|\alpha_1|-|\alpha_3|)^2\}$$

$$=(|\alpha_1|+|\alpha_3|)^2\{2(1-|\alpha_1|^2-|\alpha_3|^2)+(|\alpha_1|-|\alpha_3|)^2\}$$

$$=(|\alpha_1|+|\alpha_3|)^2\{2-(|\alpha_1|+|\alpha_3|)^2\}$$

$$=1-\{1-(|\alpha_1|+|\alpha_3|)^2\}^2$$

$$\leqq 1 \tag{5}$$

したがって $|\pi_\alpha|\leqq 1$ が成立する．

$|\pi_\alpha|=1$ となるのは，上の導き方からわかるように

$$\arg\alpha_1\alpha_2{}^*=\arg\alpha_2\alpha_3{}^* \tag{6}$$

$$|\alpha_1|+|\alpha_3|=1 \tag{7}$$

が同時に成立するときである．この条件を満たす $|\alpha\rangle$ の一般形を求めよう．

（7）および（2）より

$$|\alpha_2|^2=2|\alpha_1|\cdot|\alpha_3| \tag{8}$$

また（6）より

$$\begin{aligned}\arg\alpha_1&=\arg\alpha_2+\varphi\\ \arg\alpha_3&=\arg\alpha_2-\varphi\end{aligned}\qquad (\varphi\text{は任意の実数})\tag{9}$$

したがって，ここで

$$|\alpha_1|=a\geqslant 0,\qquad |\alpha_3|=b\geqslant 0,\qquad \arg\alpha_2=\beta$$

とおけば，（8）（9）を考慮して

$$\alpha_1=ae^{i(\beta+\varphi)},\qquad \alpha_2=\sqrt{2ab}\,e^{i\beta},\qquad \alpha_3=be^{i(\beta-\varphi)}\tag{10}$$

が得られる．絶対値が1の共通の位相を除けば，(10) で $\beta=0$ とおいて，$|\boldsymbol{\pi}_\alpha|=1$ となる $|\alpha\rangle$ の一般形は

$$|\alpha\rangle=\begin{bmatrix}ae^{i\varphi}\\ \sqrt{2ab}\\ be^{-i\varphi}\end{bmatrix}\qquad \begin{matrix}a\geqslant 0,\ b\geqslant 0\\ a+b=1\\ \varphi\text{は任意}\end{matrix}\tag{11}$$

で与えられる．

(11) の形からわかるように

$$\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix},\qquad \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$$

は $|\boldsymbol{\pi}|=1$ を与えるが

$$\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}$$

は $|\boldsymbol{\pi}|<1$ である．

問題X-17 〔第3版〕

$\langle\beta|T|\alpha\rangle$ に対する (43.6) 式が (37.2) の第2式に与えられているものと同一であることを直接証明せよ．

〔**解**〕 (43.6) は

$$\begin{aligned}\langle\beta|T|\alpha\rangle&=i\epsilon(u_\beta,(\chi_\alpha{}^+-u_\alpha))\\ E_\alpha&=E_\beta=E\end{aligned}\tag{1}$$

で与えられる．

ポテンシャルVが与えられ

$$H=H_0+V$$

と書けるときは (37.14) より

$$\chi_\alpha{}^+=u_\alpha+\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\chi_\alpha{}^+ \tag{3}$$

ただし

$$H_0u_\alpha=Eu_\alpha$$
$$H_0u_\beta=Eu_\beta \tag{4}$$

である. (3) より

$$\chi_\alpha{}^+-u_\alpha=\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\chi_\alpha{}^+$$

だからこれを (1) に代入して

$$\langle\beta|T|\alpha\rangle=i\epsilon\left(u_\beta,\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\chi_\alpha{}^+\right)$$
$$=i\epsilon\left(\frac{1}{E-H_0-i\epsilon}u_\beta,V\chi_\alpha{}^+\right)$$
$$=i\epsilon\left(\frac{1}{E-E-i\epsilon}u_\beta,V\chi_\alpha{}^+\right)$$
$$=i\epsilon\left(\frac{1}{-i\epsilon}u_\beta,V\chi_\alpha{}^+\right)$$
$$=i\epsilon\left(\frac{1}{-i\epsilon}\right)^*(u_\beta,V\chi_\alpha{}^+)$$
$$=(u_\beta,V\chi_\alpha{}^+)$$
$$=\int u_\beta{}^*(\mathbf{r})V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})d^3r$$

となって (37.2) の第二式と一致する.

問題X-18 〔第3版〕

(43.9) を変形してゆくやり方で (43.10) を導け.

〔解〕 (43.2) の上式

$$\chi_{ab}{}^+=u_{ab}+(E-H_{ab}+i\epsilon)^{-1}H'_{ab}\chi_{ab}{}^+$$

の両辺に左から $E-H_{ab}+i\epsilon$ を掛けると

$$(E-H_{ab}+i\epsilon)\chi_{ab}{}^{+}=(E-H_{ab}+i\epsilon)u_{ab}+H'_{ab}\chi_{ab}{}^{+}$$

となり

$$(H_{ab}-E)u_{ab}=0, \qquad H=H_{ab}+H'_{ab}$$

に注意すると

$$(E-H+i\epsilon)\chi_{ab}{}^{+}=i\epsilon u_{ab} \tag{1}$$

を得る．同様に（43.2）の下式に左から $E-H_{cd}-i\epsilon$ を掛けることにより

$$(E-H-i\epsilon)\chi_{cd}{}^{-}=-i\epsilon u_{cd} \tag{2}$$

を得る．

（43.9）により遷移行列は

$$\langle cd|T|ab\rangle=(u_{cd}, H'_{cd}\chi_{ab}{}^{+}) \tag{3}$$

で与えられているから（1）と H'_{cd} のエルミット性を用いると（3）の右辺は

$$(u_{cd}, H'_{cd}(E-H+i\epsilon)^{-1}i\epsilon u_{ab})$$
$$=i\epsilon(H'_{cd}u_{cd}, (E-H+i\epsilon)^{-1}u_{ab})$$

となる．ここで

$$(H-E)u_{cd}=(H_{cd}-E+H'_{cd})u_{cd}=H'_{cd}u_{cd}$$

を用いるとこれは更に変形されて

$$i\epsilon((H-E)u_{cd}, (E-H+i\epsilon)^{-1}u_{ab})$$
$$=i\epsilon(u_{cd}, (H-E)(E-H+i\epsilon)^{-1}u_{ab})$$
$$=i\epsilon(u_{cd}, (E-H+i\epsilon)^{-1}(H-E)u_{ab})$$
$$=i\epsilon((E-H-i\epsilon)^{-1}u_{cd}, (H-E)u_{ab})$$

となる．（2）および $(H-E)u_{ab}=H'_{ab}u_{ab}$ よりこれは

$$((E-H-i\epsilon)^{-1}(-i\epsilon u_{cd}), H'_{ab}u_{ab})$$
$$=(\chi_{cd}{}^{-}, H'_{ab}u_{ab})$$

に等しい．つまり（43.10）が導かれた．

問題X-19　〔第2版，IX-問10〕

入射電子と原子内電子が三重項および一重項の組合せによってではなくて，（＋＋），（＋－），（－＋），（－－）という4個のスピン関数によって記述されるものと仮定するならば．（43.40）が得られることを直接計算によっ

て示せ．

〔解〕 散乱前の2電子のスピン状態は4通の組合せ $(++)$, $(+-)$, $(-+)$, $(--)$ のどれも同等の確からしさで起こるとする．

$(++)$, $(--)$ 状態は2電子の入れ換えに対して対称であり電子の区別がつかない．そこで空間部分の波動関数は反対称でなければならない．したがって散乱断面積への寄与は確率 $\frac{1}{4}$ を考慮して*)

$$(++)\to(++)\qquad \tfrac{1}{4}|f_D(\theta)-f_E(\theta)|^2 \tag{1}$$

$$(--)\to(--)\qquad \tfrac{1}{4}|f_D(\theta)-f_E(\theta)|^2 \tag{2}$$

で与えられる．

他方 $(+-)$ または $(-+)$ では電子のスピン状態が異なり2電子の区別がつくので，散乱粒子のスピンが変わらねば直接反応，スピンが変われば交換反応ということがわかる．どちらの反応も同じ確率で起こるとすれば，散乱断面積はその和で与えられるので，ここからの寄与は

$$\left.\begin{aligned}&(+-)\to(+-),(-+)\qquad \tfrac{1}{4}(|f_D(\theta)|^2+|f_E(\theta)|^2)\\&(-+)\to(-+),(-+)\qquad \tfrac{1}{4}(|f_D(\theta)|^2+|f_E(\theta)|^2)\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

で与えられる．以上より

$$\begin{aligned}\sigma(\theta)&=\tfrac{1}{2}(|f_D(\theta)|^2+|f_E(\theta)|^2)+\tfrac{1}{2}|f_D(\theta)-f_E(\theta)|^2\\&=\tfrac{1}{4}|f_D(\theta)+f_E(\theta)|^2+\tfrac{3}{4}|f_D(\theta)-f_E(\theta)|^2\end{aligned} \tag{4}$$

であるから (43.40) [34.25] と一致する．

問題 X-20 〔第3版〕

(43.30) と (43.38) とを利用して水素原子による電子の弾性散乱の振幅に対する Born 近似を求めよ．次に前方方向でのこの振幅の値を求めて，その結果を (38.28) から得られるこれに対応する直接散乱の振幅と比較せよ．

〔解〕 (43.30) と (43.38) より交換散乱振幅は

$$f_E(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{me^2}{2\pi\hbar^2}\iint w_a{}^*(\mathbf{r}_1)\chi_\beta{}^{*-}(\mathbf{r}_2)\frac{1}{r_{12}}\chi_i{}^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 \tag{1}$$

で与えられる．ここで Born 近似を行ない

---

*) ここでの $f_D(\theta), f_E(\theta)$ はそれぞれ第2版での $f(\theta), g(\theta)$ に対応する．

$$\chi_\beta^-(\mathbf{r}_2) \to \exp(i\mathbf{k}_\beta \cdot \mathbf{r}_2),$$

$$\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \to \exp(i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_1) w_a(\mathbf{r}_2)$$

とおく．w_a は水素原子の基底状態の波動関数で

$$w_a(\mathbf{r}) = u_{100}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

である．これらを（1）に代入すると

$$f_E(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha) = -\frac{me^2}{2\pi^2 a_0^3 \hbar^2} \iint e^{-\frac{r_1+r_2}{a_0}} e^{i(\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_\beta \cdot \mathbf{r}_2)} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3r_1 d^3r_2 \tag{2}$$

となる．これが Born 近似の交換散乱振幅である．

前方 $\mathbf{k}_\beta = \mathbf{k}_\alpha$ では

$$f_E(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha) = -\frac{me^2}{2\pi^2 a_0^3 \hbar^2} \iint e^{-\frac{r_1+r_2}{a_0}} e^{i\mathbf{k}_\alpha \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3r_1 d^3r_2. \tag{3}$$

この積分を遂行しよう．まず積分変数を

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \qquad \boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

に変換する．そして固定された $\boldsymbol{\rho}$ に対して変数 $\mathbf{r}$ のかわりに $\boldsymbol{\rho}/2$ を中心として 0 と $\boldsymbol{\rho}$ を焦点とする回転楕円体座標を用いる．（図参照）つまり

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{\rho}, \qquad \eta = \frac{r_1 - r_2}{\rho}, \qquad \varphi$$

を変数にとると変域は

$$1 \leqq \xi < \infty, \qquad -1 \leqq \eta \leqq 1, \qquad 0 \leqq \varphi < 2\pi$$

で与えられ体積要素は

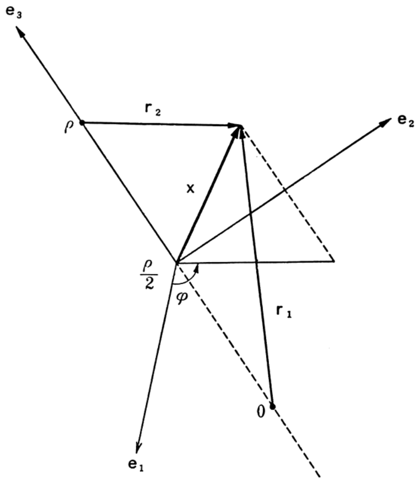
$$d^3r_1 d^3r_2 = d^3\rho\, d^3r = d^3\rho \left(\frac{\rho}{2}\right)^3 (\xi^2 - \eta^2) d\xi\, d\eta\, d\varphi$$

となる．この座標系で積分を行なって

$$\iint e^{-\frac{r_1+r_2}{a_0}} e^{i\mathbf{k}_\alpha \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3r_1 d^3r_2$$

$$= \iint_1^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} e^{-\frac{\rho\xi}{a_0}} e^{i\mathbf{k}_\alpha \cdot \boldsymbol{\rho}} \frac{1}{\rho} \left(\frac{\rho}{2}\right)^3 (\xi^2 - \eta^2) d\varphi\, d\eta\, d\xi\, d^3\rho$$

$$= 2\pi \iint_1^\infty \left(\frac{\rho}{2}\right)^3 e^{i\mathbf{k}_\alpha \cdot \boldsymbol{\rho}} \frac{1}{\rho} e^{-\frac{\rho\xi}{a_0}} \left(2\xi^2 - \frac{2}{3}\right) d\xi\, d^3\rho$$



$$\begin{cases}(\mathbf{x}\cdot\mathbf{e}_1)=\dfrac{\rho}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\cos\varphi,\\(\mathbf{x}\cdot\mathbf{e}_2)=\dfrac{\rho}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\sin\varphi,\\(\mathbf{x}\cdot\mathbf{e}_3)=\dfrac{\rho}{2}\xi\eta\end{cases}$$

図 23

$$=8\pi\int_0^\infty\int_{-1}^{+1}\int_0^{2\pi}\left(\frac{\rho}{2}\right)^3 e^{ik_\alpha\rho z}\frac{1}{\rho}\left[\left(\frac{a_0}{\rho}\right)^3+\left(\frac{a_0}{\rho}\right)^2+\frac{1}{3}\left(\frac{a_0}{\rho}\right)\right] e^{-\frac{\rho}{a_0}}d\phi\,dz\rho^2d\rho$$

$$=\frac{4\pi^2a_0{}^5}{k_\alpha a_0}\int_0^\infty[1+x+\tfrac{1}{3}x^2]e^{-x}\sin k_\alpha a_0x\,dx$$

$$=\frac{4\pi^2a_0{}^5}{3}\frac{15+10(k_\alpha a_0)^2+3(k_\alpha a_0)^4}{[1+(k_\alpha a_0)^2]^3}$$

を得るから結局

$$f_E(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha)=-\frac{2me^2}{3\hbar^2}a_0{}^2\frac{15+10(k_\alpha a_0)^2+3(k_\alpha a_0)^4}{[1+(k_\alpha a_0)^2]^3} \qquad (4)$$

となる．高エネルギー $k_\alpha a_0\gg1$ では

$$f_E(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha) \sim -\frac{2me^2}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{k_\alpha{}^2}$$

のごとく振舞い，一方（38.28）で与えられる Born 近似の直接散乱振幅は前方で

$$f_B(\theta=0)=\frac{me^2}{\hbar^2}a_0{}^2$$

となり k_α には依存しない．したがって高エネルギーでの前方散乱はほとんど直接過程で占められ交換過程からの寄与は無視できる．

〔**注意**〕 もともと Born 近似は $k_\alpha a_0 \gg 1$ でよい近似となるがその場合前方とは限らない散乱振幅（2）の主要項を求めることができる．（2）の積分を

$$\int e^{-\frac{r_2}{a_0}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2}\left\{\int \exp\left\{-\frac{|\boldsymbol{\varrho}+\mathbf{r}_2|}{a_0}+i\mathbf{k}_\alpha\cdot\boldsymbol{\varrho}\right\}\frac{1}{|\boldsymbol{\varrho}|}d^3\rho\right\}d^3r_2,$$

$$\mathbf{q}=\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k}_\beta \qquad (5)$$

と書き直す．{ } の中は

$$\int \exp\left\{-\frac{|\boldsymbol{\varrho}+\mathbf{r}_2|}{a_0}+i\mathbf{k}_\alpha\cdot\boldsymbol{\varrho}\right\}\frac{1}{|\boldsymbol{\varrho}|}d^3\rho$$

$$=\lim_{\alpha\to 0^+}\int \exp\left\{-\frac{|\boldsymbol{\varrho}+\mathbf{r}_2|}{a_0}-\alpha|\boldsymbol{\varrho}|+i\mathbf{k}_\alpha\cdot\boldsymbol{\varrho}\right\}\frac{1}{|\boldsymbol{\varrho}|}d^3\rho$$

に等しくこの右辺の積分を

$$\iint e^{-\frac{|\mathbf{r}|}{a_0}} e^{-\alpha|\boldsymbol{\varrho}|+i\mathbf{k}_\alpha\cdot\boldsymbol{\varrho}}\frac{1}{|\boldsymbol{\varrho}|}\delta^3(\mathbf{r}-\boldsymbol{\varrho}-\mathbf{r}_2)d^3r\,d^3\rho$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^3}\iiint e^{-\frac{|\mathbf{r}|}{a_0}} e^{-\alpha|\boldsymbol{\varrho}|+i\mathbf{k}_\alpha\cdot\boldsymbol{\varrho}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\boldsymbol{\varrho}-\mathbf{r}_2)}\frac{1}{|\boldsymbol{\varrho}|}d^3k\,d^3r\,d^3\rho \qquad (6)$$

としておいて公式

$$\int e^{-\frac{|\mathbf{r}|}{a_0}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3r=8\pi a_0{}^3\frac{1}{(1+\mathbf{k}^2a_0{}^2)^2},$$

$$\int e^{-\alpha|\boldsymbol{\varrho}|} e^{i(\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\varrho}}\frac{1}{|\boldsymbol{\varrho}|}d^3\rho=\frac{4\pi}{(\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k})^2+\alpha^2} \qquad (7)$$

を用いると（6）は

$$4\pi\cdot\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{1}{(\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k})^2+\alpha^2}\,\frac{8\pi a_0{}^3}{(1+\mathbf{k}^2a_0{}^2)^2}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}d^3k$$

となり，ここで $\alpha\to 0$ とし，$k_\alpha{}^2$ が大きいときのふるまいは（7）のフーリエの逆変換を用いて

$$\frac{4\pi}{k_\alpha^2}\cdot\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{8\pi a_0^3}{(1+\mathbf{k}^2a_0^2)^2}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}d^3k=\frac{4\pi}{k_\alpha^2}e^{-\frac{|\mathbf{r}_2|}{a_0}}$$

で与えられる．これを（5）に代入して再び（7）を用いると

$$\frac{4\pi}{k_\alpha^2}\cdot 8\pi\left(\frac{a_0}{2}\right)^3\left[1+\frac{\mathbf{q}^2}{4}a_0^2\right]^{-2}$$

となり，これより

$$f_E(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)\simeq-\frac{2me^2}{\hbar^2}\frac{1}{k_\alpha^2}\left[1+\frac{q^2}{4}a_0^2\right]^{-2},\qquad k_\alpha a_0\gg 1$$

を得る．

第 XI 章

輻射の半古典論的取扱い

問題XI-1　［第2版，X-問1と同一］

$\nabla\cdot\mathbf{J}=\rho=0$ の場合，Maxwell の方程式の最も一般的な解を $\nabla\cdot\mathbf{A}=\phi=0$ を満たすポテンシャルを使って表わしうることを示せ．

〔解〕 $\rho=0$ の条件のもとでは連続の方程式（44.3）[35.3] より自動的に $\nabla\cdot\mathbf{J}=0$ が成立するので，条件は $\rho=0$ のみと考えておいてよい．

$\rho=0$ に対する Maxwell の方程式（44.2）[35.2] の解 $\mathbf{E},\mathbf{H}$ を（44.4）[35.4] のごとくベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ およびスカラーポテンシャル ϕ を用いて

$$\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\phi,\qquad \mathbf{H}=\nabla\times\mathbf{A} \tag{1}$$

とあらわすと，$\mathbf{A},\phi$ は（44.7）[35.6] で $\rho=0$ とおいた式

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2}-\nabla^2\mathbf{A}\right)+\nabla\left((\nabla\cdot\mathbf{A})+\frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)=\frac{4\pi}{c}\mathbf{J}\\&\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\mathbf{A})+\nabla^2\phi=0\end{aligned} \tag{2}$$

を満たす．

ここでゲージ変換（44.5）[35.5]：

$$\begin{aligned}&\mathbf{A}\to\mathbf{A}'=\mathbf{A}+\nabla\chi,\\&\phi\to\phi'=\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\end{aligned}\qquad(\chi\text{ は }\mathbf{r},t\text{ の任意の関数}) \tag{3}$$

を行なっても，$\mathbf{E},\mathbf{H}$ に対する表式の（1）の値が変らないこと，および χ として任意の関数を選びうることを利用して χ として

$$\chi=\chi^0+g(\mathbf{r}) \tag{4}$$

をとることにする．ここで χ^0 は

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\chi^0}{\partial t}=\phi \tag{5}$$

を満たす関数であり，$g(\mathbf{r})$ は空間座標にのみ依存する任意関数とする．このとき，ϕ' は

$$\phi'=\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}=\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\chi^0}{\partial t}=0 \tag{6}$$

であるから零である．また $\mathbf{A}'$ の発散は

$$\nabla\cdot\mathbf{A}'=\nabla\cdot\mathbf{A}+\nabla^2\chi=\nabla\cdot\mathbf{A}+\nabla^2\chi^0+\nabla^2 g(\mathbf{r}) \tag{7}$$

となる．ところで（2）の第二式および（5）を用いると

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\mathbf{A}+\nabla^2\chi^0)=\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot\mathbf{A}+\nabla^2\phi=0$$

が成り立つので

$$\nabla\cdot\mathbf{A}+\nabla^2\chi^0$$

は空間座標にのみ依存する関数であることがわかる．そこで

$$\nabla\cdot\mathbf{A}+\nabla^2\chi^0\equiv h(\mathbf{r})$$

と書くことにする．また（4）式において $g(\mathbf{r})$ は任意だったので，ここで $g(\mathbf{r})$ として特に

$$\nabla^2 g(\mathbf{r})+h(\mathbf{r})=0 \tag{8}$$

となる関数を選べば（7）より

$$\nabla\cdot\mathbf{A}'=0 \tag{9}$$

が成立することになる．すなわちゲージ変換の関数 χ を適当に選ぶことにより，ゲージ変換された $\mathbf{A}',\phi'$ が（6）（9）を満たすようにできるのである．

このようにして得られた解は当然のことだがローレンツ条件 (44.8) [35.7] を満たしているので，$\rho=\nabla\cdot\mathbf{J}=0$ の場合にはローレンツ条件を満足する解の中に $\phi=\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ となるものが含まれていることがわかる．またローレンツ条件の代りに，すべての時刻において

$$\nabla\cdot\mathbf{A}=0$$

が成り立つという条件を課して解をもとめることもできる（クーロンゲージ §57-2 [§49.2]）が，この条件のもとで境界条件を満たす解は一般に

$$\phi(\mathbf{r},t)=\int\frac{\rho(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r'=\sum_i\frac{e_i}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i(t)|}$$

で与えられるので，$\rho\equiv0$ のもとでは

$$\phi=0$$

が成立することになる．これから上で求めた解は $\rho=0$ の場合にクーロンゲージを採用したときの解ということもできる．

問題XI-2　［第2版，X-問2に対応］

（44.1）［35.1］式に付随した確率密度は（7.1）［ 〃 ］で与えられること，かつこの確率の流れの密度は（7.3）［ 〃 ］とは異なったものにならなければならないことを示せ．

〔解〕（44.1）［35.1］およびその複素共役は次の式で与えられる．

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}&=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla+\frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla\cdot\mathbf{A})\right.\\
&\qquad\left.+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2+e\phi+V\right]\psi\\
i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}&=\left[+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla+\frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla\cdot\mathbf{A})\right.\\
&\qquad\left.-\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2-e\phi-V\right]\psi^*
\end{aligned}
\tag{1}
$$

位置の確率関数として

$$P(\mathbf{r},t)=|\psi(\mathbf{r},t)|^2=\psi^*\psi$$

を採用し，規格化条件

$$\int P(\mathbf{r},t)d^3r=\int|\psi(\mathbf{r},t)|^2d^3r=1 \tag{2}$$

を課す．このとき確率保存の要請が満たされることをまず示す．すなわち，確率保存の要請は，ある閉じた領域 Ω において

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega P(\mathbf{r},t)d^3r=0 \tag{3}$$

で与えられるが，（1），（2）を使って（3）の左辺を書き換えれば，

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega P(\mathbf{r},t)d^3r&=\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r\\
&=\int_\Omega\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)d^3r\\
&=\int_\Omega\left\{\frac{\hbar}{2im}[\nabla^2\psi^*\cdot\psi-\psi^*\nabla^2\psi]+\frac{e}{mc}[(\mathbf{A}\cdot\nabla\psi^*)\psi+\psi^*(\mathbf{A}\cdot\nabla\psi)]\right.
\end{aligned}
$$

$$+\frac{e}{mc}(\nabla\cdot\mathbf{A})\psi^*\psi\Big\}d^3r$$

$$=\int_\Omega\left\{\frac{\hbar}{2im}\nabla\cdot[\nabla\psi^*\cdot\psi-\psi^*\nabla\psi]+\frac{e}{mc}\nabla\cdot[\mathbf{A}\psi^*\psi]\right\}d^3r$$

$$=\int_\Omega\nabla\cdot\left[\frac{\hbar}{2im}(\nabla\psi^*\cdot\psi-\psi^*\nabla\psi)+\frac{e}{mc}\mathbf{A}\psi^*\psi\right]d^3r$$

$$=\int_A\left[\frac{\hbar}{2im}(\nabla\psi^*\cdot\psi-\psi^*\nabla\psi)+\frac{e}{mc}\mathbf{A}\psi^*\psi\right]_n dS \qquad (4)$$

となる．ただし最後の積分は §7［〃］と同様に領域 Ω を囲む表面 A において面の法線方向の成分の表面積分を表わす．ここで表面を十分に遠方へもってゆけば（4）の最後の積分は零になるので（3）が満たされることがわかる．

さらに（4）式の変形をみると，

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+\nabla\cdot\left[\frac{\hbar}{2im}(\psi^*\,\nabla\psi-\nabla\psi^*\cdot\psi)-\frac{e}{mc}\psi^*\mathbf{A}\psi\right]=0 \qquad (5)$$

が各点において成立していることがわかるので，ここで確率の流れの密度として

$$\mathbf{S}(\mathbf{r},t)\equiv\frac{\hbar}{2im}(\psi^*\nabla\psi-\nabla\psi^*\cdot\psi)-\frac{e}{mc}\psi^*\mathbf{A}\psi$$

$$=\frac{1}{2m}\left[\psi^*\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi-\psi\left(-i\hbar\nabla+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^*\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left[\psi^*\frac{1}{m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi+\psi\left\{\frac{1}{m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right\}^*\right]$$

$$=\psi^*\frac{1}{m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\ \text{の実数部分} \qquad (6)$$

を採用すれば連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\mathbf{r},t)+\nabla\cdot\mathbf{S}(\mathbf{r},t)=0$$

が成立することになる．ところで（6）で定義された $\mathbf{S}(\mathbf{r},t)$ は §7［〃］において導びかれた $\mathbf{S}(\mathbf{r},t)$ において

$$\mathbf{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla\longrightarrow\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}=\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}$$

の置き換えを行なったものになっているが，これは電磁場のあるときのハミルトニアン(24.29)［23.14］の形からみても，もっともらしい結果になっている．

問題XI-3 [第2版, X-問3と同一]

ゲージ変換 (44.5) [35.5] に伴って変換 $\psi'=\psi e^{ie\chi/\hbar c}$ を行なった場合には波動方程式 (44.1) [35.1] の形は変わらないことを示せ.

〔解〕 $\mathbf{A},\phi,\psi$ に対して同時にゲージ変換 (44.5) [35.5]

$$\mathbf{A}'=\mathbf{A}+\nabla\chi,\qquad \phi'=\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} \tag{1}$$

および (44.6)

$$\psi'=\psi e^{ie\chi/\hbar c} \tag{2}$$

を行なったとき, これらの $\mathbf{A}',\phi',\psi'$ に対して電磁場中での Schrödinger 方程式 (44.1) [35.1] が成立することを示す.

まず

$$\nabla^2\psi'=\nabla^2(\psi e^{ie\chi/\hbar c})$$
$$=e^{ie\chi/\hbar c}\left[\nabla^2\psi+2\frac{ie}{\hbar c}\nabla\chi\cdot\nabla\psi+\frac{ie}{\hbar c}(\nabla^2\chi)\psi-\left(\frac{e}{\hbar c}\right)^2(\nabla\chi)^2\psi\right]$$

$$\mathbf{A}'\cdot\nabla\psi'=(\mathbf{A}+\nabla\chi)\cdot\nabla(\psi e^{ie\chi/\hbar c})$$
$$=e^{ie\chi/\hbar c}\left[\mathbf{A}\cdot(\nabla\psi)+\frac{ie}{\hbar c}(\mathbf{A}\cdot\nabla\chi)\psi+\nabla\chi\cdot\nabla\psi+\frac{ie}{\hbar c}(\nabla\chi)^2\psi\right]$$

$$(\nabla\cdot\mathbf{A}')\psi'=\nabla\cdot(\mathbf{A}+\nabla\chi)\psi e^{ie\chi/\hbar c}=e^{ie\chi/\hbar c}[\nabla\cdot\mathbf{A}\psi+(\nabla^2\chi)\psi]$$

$$\mathbf{A}'^2\psi'=(\mathbf{A}+\nabla\chi)^2\psi e^{ie\chi/\hbar c}=e^{ie\chi/\hbar c}[\mathbf{A}^2\psi+2(\mathbf{A}\cdot\nabla\chi)+(\nabla\chi)^2]$$

$$\phi'\psi'=\left(\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\psi e^{ie\chi/\hbar c}=e^{ie\chi/\hbar c}\left[\phi\psi-\frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi\right]$$

が成立するので, これらの結果を (44.1) [35.1] の右辺において $\mathbf{A},\phi,\psi$ を $\mathbf{A}',\phi',\psi'$ で置き換えた式に代入すると

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}'\cdot\nabla+\frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla\cdot\mathbf{A}')+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}'^2+e\phi'+V\right]\psi'$$
$$=e^{ie\chi/\hbar c}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2\frac{ie}{\hbar c}\nabla\chi\cdot\nabla\psi-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{ie}{\hbar c}(\nabla^2\chi)\psi\right.$$
$$+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{e^2}{\hbar^2c^2}(\nabla\chi)^2\psi+\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla\psi+\frac{ie\hbar}{mc}\frac{ie}{\hbar c}(\mathbf{A}\cdot\nabla\chi)\psi$$
$$+\frac{ie\hbar}{mc}\nabla\chi\cdot\nabla\psi+\frac{ie\hbar}{mc}\frac{ie}{\hbar c}(\nabla\chi)^2\psi$$

$$+\frac{ie\hbar}{2mc}\nabla\cdot\mathbf{A}\psi+\frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla^2\chi)\psi$$

$$+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2\psi+\frac{e^2}{2mc^2}\cdot 2(\mathbf{A}\cdot\nabla\chi)\psi$$

$$+\frac{e^2}{2mc^2}(\nabla\chi)^2\psi+e\phi\psi-\frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi+V\psi\Bigg]$$

$$=e^{ie\chi/\hbar c}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla\psi+\frac{ie\hbar}{2mc}\nabla\cdot\mathbf{A}\psi\right.$$

$$\left.+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2\psi+e\phi\psi+V\psi\right]-e^{ie\chi/\hbar c}\frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi$$

$$=e^{ie\chi/\hbar c}i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}-e^{ie\chi/\hbar c}\frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi$$

$$=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi e^{ie\chi/\hbar c})=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'$$

となる．ゆえに ψ' は (44.1) [35.1] において $\mathbf{A},\phi$ を $\mathbf{A}',\phi'$ で置き換えた Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}'\cdot\nabla+\frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla\cdot\mathbf{A}')\right.$$

$$\left.+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}'^2+e\phi'+V\right]\psi' \tag{3}$$

を満足するので，ゲージ変換 (44.5) [35.5] に伴って同時に (44.6) の変換を ψ に対して行なえば方程式 (44.1) [35.1] の形は不変に保たれる．

[別解]　方程式 (44.1) [35.1] は (24.29) [23.14]

$$H=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+e\phi$$

より導かれたものであるから，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi+e\phi\psi+V\psi \tag{4}$$

と書くことができる．ここで交換関係

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t},\ e^{-ie\chi/\hbar c}\right]=\frac{e}{c}e^{-ie\chi/\hbar c}\frac{\partial\chi}{\partial t},$$

$$[-i\hbar\nabla,\ e^{-ie\chi/\hbar c}]=-\frac{e}{c}e^{-ie\chi/\hbar c}\nabla\chi$$

を用いると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(e^{-ie\chi/\hbar c}\psi')=e^{-ie\chi/\hbar c}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right]\psi'$$

$$\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi$$

$$=\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)(e^{-ie\chi/\hbar c}\psi')$$

$$=\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)e^{-ie\chi/\hbar c}\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\nabla\chi-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi'$$

$$=e^{-ie\chi/\hbar c}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\nabla\chi-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\nabla\chi-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi'$$

となるから（4）より

$$e^{-ie\chi/\hbar c}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\psi'$$

$$=e^{-ie\chi/\hbar c}\frac{1}{2m}\left[-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}(\mathbf{A}+\nabla\chi)\right]\cdot\left[-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}(\mathbf{A}+\nabla\chi)\right]\psi'$$

$$+e^{-ie\chi/\hbar c}(e\phi+V)\psi'$$

つまり

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)\psi'+e\phi'\psi'+V\psi' \qquad (5)$$

が得られる．これは（4）式に変換（1）（2）をほどこしたものに他ならない．

問題XI-4 ［第2版，X-問4と同一］

eは電子の荷電，Aは摂氏数千度の空洞内の輻射に相当するスペクトルの可視部に対するベクトルポテンシャルの大きさ，pは水素の最初の励起状態にある電子の運動量としたときの eA/cp のオーダーを算定せよ．

〔**解**〕 pに対しては問題IV-**13**の結果より

$$\langle T_n\rangle=\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}$$

であるので，p^2 の平均値が得られ，これより大きさを評価できる．すなわち最初の励起状態に対して

$$\langle T_2\rangle=\frac{Z^2e^2}{2a_0\times 2^2}=\frac{\langle p^2\rangle}{2m}$$

より

$$\langle p^2\rangle=\frac{me^2}{4a_0}=\frac{me^2}{4}\cdot\frac{me^2}{\hbar^2}=\left(\frac{me^2}{2\hbar}\right)^2 \tag{1}$$

が得られる．

次にベクトルポテンシャルの大きさAは，空洞輻射の強度から求まる．平面波に伴う光の強度は（44. 12）[35. 12]

$$\frac{\omega^2}{2\pi c}|\mathbf{A}_0|^2$$

で与えられる．他方空洞輻射のエネルギー強度は Planck の分布公式を使って（45. 23）[36. 23] で与えられるので，これと同じ強度を与える平面波のベクトルポテンシャルの大きさは

$$\frac{\omega^2}{2\pi c}|\mathbf{A}_0|^2=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^2(e^{\hbar\omega/\kappa T}-1)}\Delta\omega$$

なる関係で与えられる．ただしここで $\Delta\omega$ は可視光線のある領域に対応してとられる．または可視光線の全領域を考えるときには $\Delta\omega$ が小さくはないので，右辺を積分で置き換えて

$$\frac{\omega^2}{2\pi c}|\mathbf{A}_0|^2=\int_{\omega_1}^{\omega_2}\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^2(e^{\hbar\omega/\kappa T}-1)}d\omega \tag{2}$$

となる．（2）式の右辺は空洞輻射の可視光線領域にわたっての全エネルギー強度であり，左辺は可視光線をある角振動数ωの単色光で代表させたとき，同じ強度をその単色光の振動数ω，およびベクトルポテンシャル $\mathbf{A}_0$ であらわしたものである．

さて（2）の積分範囲は可視光線の波長 4000Å～8000Å に対応して $\omega_1\sim 2.4\times10^{15}$/sec から $\omega_2\sim 4.7\times10^{15}$/secにわたってとられるべきであるが，簡単のため（2）の積分をωの全領域にわたる積分で置き換えしてしまおう．このようにしてもAの大きさを上からおさえるにはさしつかえはない．

すると（2）の右辺は

$$\int_0^\infty I(\omega)d\omega=\int_0^\infty\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^2(e^{\hbar\omega/\kappa T}-1)}d\omega$$

で置き換えられ，この積分は $\hbar\omega/\kappa T=x$ なる変換で

$$\int_0^\infty I(\omega)d\omega=\frac{\hbar}{\pi^2c^2}\left(\frac{\kappa T}{\hbar}\right)^4\int_0^\infty\frac{x^3dx}{e^x-1}$$
$$=\frac{\hbar}{\pi^2c^2}\left(\frac{\kappa T}{\hbar}\right)^4\sum_{n=1}^\infty\int_0^\infty x^3e^{-nx}dx$$
$$=\frac{\hbar}{\pi^2c^2}\left(\frac{\kappa T}{\hbar}\right)^4 3!\sum_{n=1}^\infty\frac{1}{n^4}$$
$$=\frac{\hbar}{\pi^2c^2}\left(\frac{\kappa T}{\hbar}\right)^4 3!\ \zeta(4) \qquad (3)$$

ここで $\zeta(x)$ は Riemann のツェーター関数で $\zeta(4)=\dfrac{\pi^4}{90}$ である．（3）は空洞輻射の強度に対するシュテファン・ボルツマンの法則である．さて（3）を（2）に代入することにより A の大きさに対する関係式

$$\frac{\omega^2}{2\pi c}|\mathbf{A}_0|^2=\frac{\hbar}{\pi^2c^2}\left(\frac{\kappa T}{\hbar}\right)^4 3!\frac{\pi^4}{90}=\frac{1}{15}\frac{\pi^2\kappa^4}{c^2\hbar^3}T^4$$

または

$$A^2\equiv|\mathbf{A}_0|^2=\frac{2\pi c}{\omega^2}\cdot\frac{1}{15}\frac{\pi^2\kappa^4}{c^2\hbar^3}T^4 \qquad (4)$$

が得られる．

（1），（4）より

$$\left(\frac{eA}{cp}\right)^2=\frac{e^2}{c^2}\left(\frac{2\hbar}{me^2}\right)^2\frac{2\pi c}{\omega^2}\times\left(\frac{\pi^2\kappa^4}{15c^2\hbar^3}\right)T^4$$

となる．ここで

$e=4.80\times10^{-10}$ esu

$c=3.00\times10^{10}$ cm/sec

$\hbar=1.0\times10^{-27}$ erg·sec

$m=0.911\times10^{-27}$g

$\kappa=1.38066\times10^{-16}$ erg/°K

および

$\omega=3\times10^{15}\text{sec}^{-1}$（波長約 6000Å に対応）

$T=10^4$°K

を使って計算すると

$$\left(\frac{eA}{cp}\right)^2\simeq18.7\times10^{-10}$$

または

$$\frac{eA}{cp} \simeq 4.3\times 10^{-5}$$

となるが，この値は1に比べて相当に小さいので，ハミルトニアンにおいて $\mathbf{A}\cdot\nabla$ を含む項を摂動として取扱うことが十分に正当性をもつといえる．

問題XI-5　［第2版，X-問5と同一］

（44.20）［35.20］式を行列の方法を用いずに，波動方程式を使って証明せよ．

〔解〕 摂動のない場合のハミルトニアンのエネルギー固有関数 u_k, u_n に対しては

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_n + Vu_n &= E_n u_n \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_k^* + Vu_k^* &= E_k u_k^* \end{aligned} \qquad (1)$$

が成立する．ここで $\mathbf{A}$ 方向を向いた単位ベクトルを

$$\mathbf{a}=\frac{\mathbf{A}}{|\mathbf{A}|}, \qquad |\mathbf{a}|=1$$

とし，（1）の上式に $u_k^*(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})$ をかけたものと，（1）の下式に $(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})u_n$ をかけたものの差をとると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[(\nabla^2 u_k^*)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})u_n - u_k^*(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})\nabla^2 u_n] = (E_k-E_n)u_k^*(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})u_n$$

となる．この式を全空間にわたって積分すると

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}&\int[\nabla^2 u_k^*(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})u_n - u_k^*(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})\nabla^2 u_n]d^3r \\ &= (E_k-E_n)\int u_k^*(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})u_n\, d^3r \end{aligned} \qquad (2)$$

が得られるが，ここで左辺に部分積分を適用し，u_n, u_k が境界での周期条件を満たすこと，または遠方で零になることを使い，さらに $\nabla(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})=\mathbf{a}$ を考慮すれば左辺は

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla u_k^*\cdot\nabla\{(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})u_n\}d^3r - \frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\{u_k^*(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})\}\cdot\nabla u_n d^3r$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\int[(\nabla u_k^*)\cdot\mathbf{a}u_n + (\nabla u_k^*)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})(\nabla u_n)]d^3r$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int[u_k{}^*\mathbf{a}\cdot\nabla u_n+(\nabla u_k{}^*)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})(\nabla u_n)]d^3r$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\int[(\mathbf{a}\cdot\nabla u_k{}^*)u_n-u_k{}^*(\mathbf{a}\cdot\nabla u_n)]d^3r$$

もう一度部分積分を使って

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int[u_k{}^*(\mathbf{a}\cdot\nabla u_n)+u_k{}^*(\mathbf{a}\cdot\nabla u_n)]d^3r$$

$$=-\frac{\hbar^2}{m}\int u_k{}^*(\mathbf{a}\cdot\nabla u_n)d^3r$$

したがって（2）は

$$-\frac{\hbar^2}{m}\int u_k{}^*(\mathbf{a}\cdot\nabla u_n)d^3r=(E_k-E_n)\int u_k{}^*(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})u_nd^3r$$

が得られる．ここで

$$\mathbf{a}\cdot\nabla=\nabla_A,\qquad \mathbf{a}\cdot\mathbf{r}=r_A,\qquad \omega_{kn}=\frac{1}{\hbar}(E_k-E_n)$$

を使って書きかえれば

$$\int u_k{}^*\nabla_A u_nd^3r=-\frac{m}{\hbar}\omega_{kn}\int u_k{}^*r_Au_nd^3r \tag{3}$$

が成立する．

問題XI-6　［第2版，X-問6と同一］

遷移振動数の近傍での場の一つの状態当りに1個の量子が存在するような強度の等方的な場によって生じる誘導放出を考えれば，この誘導放出の遷移確率は自然放出の遷移確率に等しくなっていることを示せ．

〔**解**〕誘導放出に対する単位時間当りの遷移確率は（44.23）[36.21]：

$$\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2c}I(\omega_{kn})|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \tag{1}$$

で与えられ，自然放出に対する単位時間当りの遷移確率は（45.22）[36.22]：

$$\frac{4e^2k^2\omega_{kn}}{3\hbar c}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2=\frac{4e^2\omega_{kn}{}^3}{3\hbar c^3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \tag{2}$$

である．そこで問題に与えられたような場に対して（1）を計算し，これを（2）と比較することにする．

まず遷移振動数 ω_{kn} の近傍での場の状態一つ当りに1個の光子が存在するような場での入射強度 $I(\omega_{kn})$ を求めておかねばならない．本文 §35-7 で計算したのと同様にして光子の状態密度を求めることから始める．

一辺が L の箱の中では $\mathbf{k}$ のとりうる値は

$$k_x=2\pi\frac{n_x}{L},\qquad k_y=2\pi\frac{n_x}{L},\qquad k_z=2\pi\frac{n_z}{L},\qquad n_x, n_y, n_z=0, \pm1, \pm2, \cdots$$

の値に限られる．したがって領域 dk_x, dk_y, dk_z 内に含まれる状態の数は

$$dn=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x\,dk_y\,dk_z$$

である．ここで $k=|\mathbf{k}|=\omega/c, \theta, \phi$ を変数とする球座標を導入すれば

$$dn=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2\sin\theta\,dk\,d\theta\,d\phi$$

$$=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\sin\theta\frac{d\omega}{c}d\theta\,d\phi$$

と表わされる．ここで空間が等方的であることを考慮して角度について積分を行なってしまえば，角振動数 ω の近くの $d\omega$ の領域に含まれる状態の数は体積 L^3 の空間内に

$$dn=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\frac{4\pi}{c}d\omega$$

で与えられることになる．ところで実際には同じ (n_x, n_y, n_z) に対して光子は偏りの異なった2通りの状態をとりうるので，この自由度2をかけて

$$dn=2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\frac{4\pi}{c}d\omega=\frac{L^3\omega^2}{\pi^2c^3}d\omega$$

としておかねばならない．状態密度は単位体積当りの状態の数だからこれより

$$\rho(\omega)d\omega=dn/L^3=\frac{\omega^2}{\pi^2c^3}d\omega$$

なる関係が得られる．

単位体積の空間に含まれているこの場の全エネルギーは，各状態がエネルギー $\omega\hbar$ の光子で占められていることを考慮して

$$\hbar\omega\rho(\omega)d\omega=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}d\omega$$

となる．この場の強度，すなわち単位時間に単位面積に入射するエネルギーは，体積 $c\times1$ 内に含まれているエネルギーに相当するので

$$I(\omega)d\omega = c\times\hbar\omega\rho(\omega)d\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^2}d\omega$$

すなわち

$$I(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^2} \tag{3}$$

が得られる．（3）を（1）に代入すれば

$$\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2c}\frac{\hbar\omega_{kn}^3}{\pi^2c^2}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 = \frac{4e^2\omega_{kn}^3}{3\hbar c^3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$$

が導かれるが，この式は自然放出に対する単位時間当りの遷移確率（2）に外ならない．

問題XI-7　［第2版，X-問7と同一］

最初の励起状態 $(2P)$ にある1個の水素原子が空洞内におかれている．自然放出および誘導放出に対する遷移確率が等しくなる空洞の温度はいくらぐらいか？

〔**解**〕 誘導放出の単位時間当りの遷移確率は（44.23）[35.23]：

$$\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2c}I(\omega_{kn})|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$$

であり，自然放出の単位時間当りの遷移確率は（45.22）[36.22]：

$$\frac{4e^2\omega_{kn}^3}{3\hbar c^3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$$

で与えられる．したがってこれらの遷移確率が等しくなるためには

$$I(\omega_{kn}) = \frac{\hbar}{\pi^2c^2}\omega_{kn}^3 \tag{1}$$

でなければならない．この関係は前問ですでに導びかれた式である．

ところで水素原子は空洞中におかれているので，$I(\omega)$ に対しては（45.23）[36.23] より

$$I(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^2(e^{\hbar\omega/\kappa T}-1)} \tag{2}$$

なる関係が成立っているはずである．（1）（2）より

$$e^{\hbar\omega_{kn}/\kappa T}-1=1$$

または

$$\frac{\hbar\omega_{kn}}{\kappa T}=\ln 2$$

すなわち

$$T=\frac{\hbar\omega_{kn}}{\kappa\ln 2}=\frac{1}{\kappa\ln 2}(E_k-E_n) \tag{3}$$

となる．水素原子の最初の励起状態は $n=2$ であるが，$2S\rightarrow 1S$ の遷移は §44-7 [§37.4] にあるように強く禁止されているので，起こりうる遷移は問題にあるように $2P\rightarrow 1S$ である．さてこのときの温度は

$$E_2-E_1=\left\{-\frac{e^2}{8a_0}-\left(-\frac{e^2}{2a_0}\right)\right\}=\frac{3e^2}{8a_0}=\frac{3\times(4.80\times10^{-10})^2}{8\times(5.29\times10^{-9})}\,\text{erg}$$

$$\kappa=1.38066\times10^{-16}\,\text{erg/°K}$$

$$\ln 2=0.69315$$

を（3）に代入して

$$T\simeq 1.7\times10^{5}\,\text{°K}$$

となる．

問題 XI-8　［第2版，X-問8と同一］

最初の励起状態にある水素原子の自然放出による単位時間当りの遷移確率は $\sec^{-1}$ で表わしてどの程度か？

〔**解**〕 自然放出における単位時間当りの遷移確率（45.22）[36.22] は

$$\frac{4e^2k^2\omega_{kn}}{3\hbar c}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2=\frac{4e^2\omega_{kn}^3}{3\hbar c^3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$$

であるが，本文の記述にしたがうと，光を放出する場合には k を最初の状態に，n を最終状態にとっているので，状態 n に対しては水素原子の基底状態 u_{100} をとり，状態 k に対しては最初の励起状態 $n=2$ に対する波動関数をとってやればよい．ただし $2S\rightarrow 1S$ の遷移は強く禁止されているので，u_{200} は現われず，P 状態 $(l=1)$ に対応する u_{210}, $u_{21\pm1}$ である．

まず $2P\rightarrow 2S$ の遷移に対する行列要素 $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ を計算する．$\mathbf{r}$ の成分 x, y, z の行列要素は，最初の状態が $l=1$，$m=0$，±1 のいずれであるかにしたがってそれぞれ

$$\begin{pmatrix} l=1 \\ m=0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} l=0 \\ m=0 \end{pmatrix}$$

$$\int u_{210}{}^* \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} u_{100} d^3r$$

$$= \int R_{21}(r) Y_{10}{}^*(\theta, \phi) \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

$$= \left[\int_0^\infty R_{21}(r) r R_{10}(r) r^2 dr \right]$$

$$\times \left[\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{10}{}^*(\theta, \phi) \begin{Bmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{Bmatrix} Y_{00}(\theta, \phi) \sin\theta \, d\theta \, d\phi \right] \tag{1}$$

$$\begin{pmatrix} l=1 \\ m=\pm 1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} l=0 \\ m=0 \end{pmatrix}$$

$$\int u_{21\pm 0}{}^* \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} u_{100} d^3r$$

$$= \int R_{21}(r) Y_{1\pm 1}{}^*(\theta, \phi) \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

$$= \left[\int_0^\infty R_{21}(r) r R_{10}(r) r^2 dr \right]$$

$$\times \left[\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{1\pm 1}{}^*(\theta, \phi) \begin{Bmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{Bmatrix} Y_{00}(\theta, \phi) \sin\theta \, d\theta \, d\phi \right] \tag{2}$$

で与えられる．ここで

$$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0 \sqrt{3}} e^{-r/2a_0}$$

$$R_{10}(r) = \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-r/a_0}$$

$$Y_{10}(\theta, \phi) = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta, \qquad Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2},\qquad E_1=-\frac{e^2}{2a_0},\qquad E_2=-\frac{e^2}{8a_0}$$

である．

（1）（2）において動径方向の積分は共通であるが，その値は

$$\int_0^\infty R_{21}(r)R_{10}(r)r^3d^3r$$

$$=\int_0^\infty\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}e^{-r/2a_0}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}2e^{-r/a_0}r^3dr$$

$$=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{a_0\sqrt{3}}\cdot 2\int_0^\infty e^{-3r/2a_0}r^4dr$$

$\dfrac{3}{2a_0}r=\rho$ とおいて

$$=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{a_0\sqrt{3}}\cdot 2\left(\frac{2}{3}a_0\right)^5\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^4d\rho$$

$$=\frac{2^8}{3^4\sqrt{6}}a_0 \tag{3}$$

となる．角部分の積分は最初の状態の磁気量子数 $m=0,\ \pm1$ のそれぞれに対応して，

$$\begin{pmatrix}l=1\\m=0\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}l=0\\m=0\end{pmatrix}$$

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}Y_{10}^*(\theta,\phi)\begin{Bmatrix}\sin\theta\cos\phi\\\sin\theta\sin\phi\\\cos\theta\end{Bmatrix}Y_{00}(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

$$=\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta\begin{Bmatrix}\sin\theta\cos\phi\\\sin\theta\sin\phi\\\cos\theta\end{Bmatrix}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

$$=\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\int_0^\pi\cos\theta\begin{Bmatrix}\sin\theta\\\sin\theta\\\cos\theta\end{Bmatrix}\sin\theta\,d\theta\right]\times\left[\int_0^{2\pi}\begin{Bmatrix}\dfrac{e^{i\phi}+e^{-i\phi}}{2}\\\dfrac{e^{i\phi}-e^{-i\phi}}{2i}\\1\end{Bmatrix}d\phi\right]$$

$$=\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\times\begin{Bmatrix}0\\0\\\dfrac{2}{3}\end{Bmatrix}\times\begin{Bmatrix}0\\0\\2\pi\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}0\\0\\\sqrt{\dfrac{1}{3}}\end{Bmatrix} \tag{4}$$

$$\begin{pmatrix}l=1\\m=1\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}l=0\\m=0\end{pmatrix}$$

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi} Y_{11}{}^*(\theta,\phi)\begin{Bmatrix}\sin\theta\cos\phi\\ \sin\theta\sin\phi\\ \cos\theta\end{Bmatrix} Y_{00}(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

$$=\int_0^\pi\int_0^{2\pi} -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta e^{-i\phi}\begin{Bmatrix}\sin\theta\cos\phi\\ \sin\theta\sin\phi\\ \cos\theta\end{Bmatrix}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

$$=-\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\int_0^\pi \sin\theta\begin{Bmatrix}\sin\theta\\ \sin\theta\\ \cos\theta\end{Bmatrix}\sin\theta\,d\theta\right]\times\left[\int_0^{2\pi} e^{-i\phi}\begin{Bmatrix}\dfrac{e^{i\phi}+e^{-i\phi}}{2}\\ \dfrac{e^{i\phi}-e^{-i\phi}}{2i}\\ 1\end{Bmatrix}d\phi\right]$$

$$=-\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\begin{Bmatrix}\frac{4}{3}\\ \frac{4}{3}\\ 0\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}\frac{2\pi}{2}\\ \frac{2\pi}{2i}\\ 0\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}-\sqrt{\frac{1}{6}}\\ \sqrt{\frac{1}{6}}i\\ 0\end{Bmatrix} \qquad (5)$$

同様にして

$$\begin{pmatrix}l=1\\ m=-1\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}l=0\\ m=0\end{pmatrix}$$

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi} Y_{1-1}{}^*(\theta,\phi)\begin{Bmatrix}\sin\theta\cos\phi\\ \sin\theta\sin\phi\\ \cos\theta\end{Bmatrix} Y_{00}(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi=\begin{Bmatrix}\sqrt{\frac{1}{6}}\\ \sqrt{\frac{1}{6}}i\\ 0\end{Bmatrix} \qquad (6)$$

が得られる．(3)(4)(5)(6)より $2P\to 1S$ の各遷移に対して行列要素 $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ は次のようになる．

$$\int u_{210}{}^*\begin{Bmatrix}x\\ y\\ z\end{Bmatrix}u_{100}d^3r=\frac{2^8a_0}{3^4\sqrt{6}}\begin{Bmatrix}0\\ 0\\ \sqrt{\frac{1}{3}}\end{Bmatrix}$$

$$\int u_{211}{}^*\begin{Bmatrix}x\\ y\\ z\end{Bmatrix}u_{100}d^3r=\frac{2^8a_0}{3^4\sqrt{6}}\begin{Bmatrix}-\sqrt{\frac{1}{6}}\\ \sqrt{\frac{1}{6}}i\\ 0\end{Bmatrix} \qquad (7)$$

$$\int u_{21-1}{}^*\begin{Bmatrix}x\\ y\\ z\end{Bmatrix}u_{100}d^3r=\frac{2^8a_0}{3^4\sqrt{6}}\begin{Bmatrix}\sqrt{\frac{1}{6}}\\ \sqrt{\frac{1}{6}}i\\ 0\end{Bmatrix}$$

（7）より最初の状態として $m=0,\ \pm1$ のいずれをとっても

$$|\langle 21m|\mathbf{r}|100\rangle|^2$$
$$=|\langle 21m|x|100\rangle|^2+|\langle 21m|y|100\rangle|^2+|\langle 21m|z|100\rangle|^2=\frac{2^{16}\times a_0{}^2}{3^8\times 6}\times\frac{1}{3}$$

となり等しいので，どの状態からの遷移確率も等しいことがわかる．また最初の状態は $m=0,\ \pm1$ の状態が等確率であったとすれば，行列成分の2乗は各状態についての平均であるが，上のことからこうして平均をとった結果は

$$|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2=\frac{2^{16}\times a_0{}^2}{3^8\times 6}\times\frac{1}{3} \tag{8}$$

となる．$\mathbf{r}$ の各成分 x, y, z の行列要素についても同様にして最初の状態 $m=0,\ \pm1$ についての平均をとったものを考えると，

$$|\langle k|x|n\rangle|^2=|\langle k|y|n\rangle|^2$$
$$=|\langle k|z|n\rangle|^2=\frac{2^{16}\times a_0{}^2}{3^8\times 6}\times\frac{1}{3}\times\frac{1}{3}=\frac{1}{3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \tag{9}$$

が成立することがわかる．これより最初の状態が特定の m に対するかたよりがなければ，どの方向への光の放出も同じ強度であることがわかる．なお上の（8）（9）の関係式については（44.23）[35.23] を導く際の本文の説明および問題XI-10の注を参照のこと．

さてこうして，最初 $2P$ のいずれかの状態にあった水素原子が x, y, z 方向のいずれかの偏りの光を放出して基底状態へ移る単位時間当りの遷移確率は（8）を一番最初の式に代入し，かつ

$$\omega_{kn}=\frac{1}{\hbar}(E_2-E_1)=\frac{1}{\hbar}\frac{3e^2}{8a_0}$$

$$a_0=5.29\times 10^{-9}\,\mathrm{cm}$$

$$\frac{e^2}{\hbar c}=1/137$$

$$c=3.00\times 10^{10}\,\mathrm{cm/sec}$$

を考慮すれば

$$\frac{4e^2\omega_{kn}{}^3}{3\hbar c^3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2=\frac{4e^2\omega_{kn}{}^3}{3\hbar c^3}\cdot\frac{2^{16}a_0{}^2}{3^8\times 6\times 3}=\frac{2^8}{3^8}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\frac{c}{a_0}\simeq 6.3\times 10^8/\mathrm{sec}$$

が得られる．こうして実際に計算した値が1に比べて相当に大きいことは“確率”を計算したことからみておかしく感じられるかもしれない．しかし（44.16）[35.16] から

(44.17) [35.17] を導く方法からわかるように，ここで使用した単位時間当りの遷移確率を与える式 (45.22) [36.22] が有効なのは時刻 $t=0$ からある時刻 t までの間に遷移が起こってしまっている確率 $|a^{(1)}(t)|^2$ が t に比例する限りにおいてである．ところで確率に対する要請より $|a^{(1)}(t)|^2 \leqq 1$ でなければならないが，このことは単位時間当りの遷移確率 $\frac{1}{t}|a^{(1)}(t)|^2$ に対して

$$\frac{1}{t}|a^{(1)}(t)|^2 \leqq \frac{1}{t}$$

を要請する．すなわち，時刻 t が

$$t \lesssim t_0 = \left[\frac{1}{t}|a^{(1)}(t)|^2\right]^{-1}$$

を満たすところでのみ上の計算は有効であり，それより大きな t に対しては遷移確率 $|a^{(1)}(t)|^2 \simeq 1$ となっているはずである．この境界の値 t_0 は単位時間当りの遷移確率の逆数だからこの場合には

$$t_0 \simeq (6.3\times10^8)^{-1} \simeq 1.6\times10^{-9}\,\mathrm{sec}$$

である．このことから以上の近似による計算によれば，$l=1$ の最初の励起状態にあった水素原子は 1.6×10^{-9} sec 後にはほとんど基底状態に移ってしまっていることになるので t_0 は $2P$ 状態の“寿命”ということができる．

なお（7）の行列要素を一般の場合に計算することについては問題XI-10の注および問題XII-13を参照のこと．

問題XI-9 ［第2版，X-問9と同一］

一次元調和振動子の許容遷移に対する選択則はどうなるか？　また，最初の励起状態にある振動子の自然放出による単位時間当りの遷移確率は sec^{-1} で表わしてどの程度か？　ただし，e, m, ω は問題8と同じとする．

〔**解**〕 一次元なので $\mathbf{r}\to x$ と置き換え，前問と同様に最初の状態を k，最終状態を n とすれば単位時間当りの遷移確率は (45.22) [36.22] から

$$\frac{4e^2k^2\omega_{kn}}{3\hbar c}|\langle k|x|n\rangle|^2 = \frac{4e^2\omega_{kn}{}^3}{3\hbar c^3}|\langle k|x|n\rangle|^2 \qquad (1)$$

として計算すればよい．摂動のないときの波動関数は (13.13) [〃] で与えられ

$$u_n=N_nH_n(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$N_n=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}},\qquad \alpha^4=\left(\frac{mK}{\hbar^2}\right),\qquad \omega_c=\left(\frac{K}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$E_n=(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c$$

である．

行列要素の計算は（13.18）［ 〃 ］を使えば直ちに求まり

$$\int_{-\infty}^{\infty}u_n^*(x)xu_m(x)dx=\begin{cases}\dfrac{1}{\alpha}\left(\dfrac{n+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}} & m=n+1\\ \dfrac{1}{\alpha}\left(\dfrac{n}{2}\right)^{\frac{1}{2}} & m=n-1\\ 0 & \text{その他}\end{cases}\tag{2}$$

であるので，選択則は $\Delta n=\pm1$ であることがわかる．

さてこの問題では最初の状態は u_1，最終状態は u_0 であるから

$$\omega_{kn}=\frac{1}{\hbar}(E_1-E_0)=\omega_c=\sqrt{\frac{K}{m}}$$

であり，この値を前問での ω_{kn} に等しくとればよい．すなわち

$$\omega_{kn}=\omega_c=\sqrt{\frac{K}{m}}=\frac{3e^2}{8\hbar a_0}$$

となる．この条件および（2）を（1）に代入すれば単位時間当りの遷移確率は

$$\frac{4e^2\omega_{kn}^3}{3\hbar c^3}\left|\int_{-\infty}^{\infty}u_1^*(x)xu_0(x)dx\right|^2$$

$$=\frac{4e^2}{3\hbar c^3}\left(\frac{3e^2}{8\hbar a_0}\right)^3\left\{\frac{1}{\alpha}\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\right\}^2$$

$$=\frac{3}{2^5}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\frac{c}{a_0}$$

ここで

$$\frac{e^2}{\hbar c}=\frac{1}{137}$$

$$c=3.00\times10^{10}\ \text{cm/sec}$$

$$a_0=5.29\times10^{-9}\ \text{cm}$$

を代入してやれば $\simeq1.5\times10^9$/sec が得られる．この値から前問の最後に述べたようにして，最初の励起状態の寿命は $t_0\simeq6.6\times10^{-10}$ sec となる．

問題XI-10　［第2版，XI-問10と同一］

電子衝撃による一電子原子の励起で，それに対応する輻射遷移が許容遷移である場合には，この励起の断面積には第IX章問題9［30.11］にあるような対数因子が常に表われることを示せ．かつ，電子衝撃による励起に対する断面積とそれに対応した自然放出に対する遷移確率との間に成り立ちうる最も簡単な関係を導け．ただし，その輻射遷移は許容遷移であるものと仮定せよ．

〔**解**〕 この系の摂動のないときのハミルトニアン H_0 は

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_1{}^2-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_2{}^2-\frac{Ze^2}{r_2}$$

であり，摂動のハミルトニアン H' は

$$H'=\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{Ze^2}{r_1}$$

である．ここで電子の質量と換算質量の違いを無視し μ とおいた．

始状態としては伝播ベクトル $\mathbf{k}_\alpha$ で入射する電子と n_1, l_1, m_1 状態の一電子原子が存在している状態をとり，終状態としては伝播ベクトル $\mathbf{k}_\beta$ で遠ざかる電子と n_2, l_2, m_2 状態に励起された原子とを合わせた状態をとる．この励起に対する Born 近似の行列要素は $n=(n_1, l_1, m_1)$，$k=(n_2, l_2, m_2)$ とすれば (38.24)［30.5］と同様に

$$|C|^2e^2\iint\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1)\left(\frac{1}{r_{12}}-\frac{Z}{r_1}\right)u_k{}^*(\mathbf{r}_2)u_n(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 \qquad (1)$$

で与えられる．ここに

$$\mathbf{q}=\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k}_\beta$$

でありエネルギー保存則より $k_\beta{}^2, k_\alpha{}^2$ は

$$k_\beta{}^2=k_\alpha{}^2-\left(\frac{1}{n_1{}^2}-\frac{1}{n_2{}^2}\right)\frac{Z^2}{a_0{}^2}=k_\alpha{}^2-\frac{2\mu}{\hbar}\omega_{kn} \qquad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \qquad (2)$$

なる関係で結ばれている．

励起反応を考えているので $n_1<n_2$ であり，このときは（1）において Z/r_1 を含む積分は，$u_k(\mathbf{r}_2), u_n(\mathbf{r}_2)$ の直交性により零となる．また $1/r_{12}$ を含む積分は (38.26) の下の式［30.7］を用いると

$$\frac{4\pi|C|^2e^2}{q^2}\int\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})u_k^*(\mathbf{r})u_n(\mathbf{r})d^3r \tag{3}$$

となる．これから Born 近似の散乱振幅は（38.21）より

$$\begin{aligned}f(\mathbf{k}_\beta,k\,;\mathbf{k}_\alpha,n)&=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2|C|^2}\cdot\frac{4\pi|C|^2e^2}{q^2}\langle k|\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})|n\rangle\\&=-\frac{2}{a_0}\frac{1}{q^2}\langle k|\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})|n\rangle\end{aligned} \tag{4}$$

で与えられる．微分断面積は（38.23）より

$$\begin{aligned}\sigma(\mathbf{k}_\beta,k\,;\mathbf{k}_\alpha,n)&=\frac{v_\beta}{v_\alpha}|f(\mathbf{k}_\beta,k\,;\mathbf{k}_\alpha,n)|^2\\&=\frac{k_\beta}{k_\alpha}\frac{4}{a_0^2}\frac{1}{q^4}|\langle k|\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})|n\rangle|^2\end{aligned} \tag{5}$$

であり，全断面積は（５）を散乱角について積分して

$$\sigma(k\,;n)=\frac{4\pi}{a_0^2}\frac{1}{k_\alpha^2}\int_{(k_\alpha-k_\beta)^2}^{(k_\alpha+k_\beta)^2}\frac{1}{q^4}|\langle k|\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})|n\rangle|^2d(q^2) \tag{6}$$

で与えられる．$k_\alpha\to\infty$ のときこの積分区間の上限は（２）より $(k_\alpha+k_\beta)^2\simeq(2k_\alpha)^2$ で大きくなり，また下限は $(k_\alpha-k_\beta)^2\simeq\left(\frac{\mu}{k_\alpha\hbar}\omega_{kn}\right)^2$ で小さくなる．（６）の積分が発散して対数因子を含むか否かは被積分関数の q が小さいときのふるまいに依存している．q が小さいとき

$$\begin{aligned}&\langle k|\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})|n\rangle\\&\quad=\langle k|n\rangle+i\mathbf{q}\cdot\langle k|\mathbf{r}|n\rangle+O(q^2)\end{aligned}$$

であり，この右辺第一項は直交性より零，第二項は題意より零ではない．ここで（44.21）[35.21] 以下にあると同様に $\mathbf{q}$ と $\mathbf{r}$ の間の角を Θ とすると

$$|i\mathbf{q}\cdot\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2=q^2|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2\cos^2\Theta$$

であるが，もし外力の作用によって k,n 各状態の磁気量子数が特定の値にそろえられているということが起こっていなければ，$|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$ の値が等しくなる状態間で平均をとることにし $\cos^2\Theta$ の値を $\frac{1}{3}$ で置き換え，$\frac{1}{3}q^2|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$ とする[注]．すると（６）の被積分関数は q が小さいとき

$$\frac{1}{3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2\frac{1}{q^2}$$

とふるまい仮定により $1/q^2$ の係数は零でないので，積分を遂行すると $k_\alpha\to\infty$ のとき対数的発散をする項が含まれていることがわかる．

q が零に近づけるのは $\mathbf{k}_\beta$ が $\mathbf{k}_\alpha$ に平行：

$$\mathbf{k}_\beta = k_\beta \mathbf{e}_\alpha, \quad \mathbf{k}_\alpha = k_\alpha \mathbf{e}_\alpha, \quad |\mathbf{e}_\alpha| = 1$$

でしかも $k_\alpha \to \infty$ のときだから（5）式の微分断面積に対して

$$\lim_{k_\alpha \to \infty} (k_\alpha - k_\beta)^2 \sigma(k_\beta \mathbf{e}_\alpha, k\,;\,k_\alpha \mathbf{e}_\alpha, n) = \frac{4}{3a_0{}^2} |\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \tag{7}$$

一方自然放出の単位時間当りの遷移確率は（45.22）[36.22]：

$$t(k\,;\,n) = \frac{4e^2 \omega_{kn}{}^3}{3\hbar c^3} |\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \tag{8}$$

で与えられるので，両者の間の関係は

$$\begin{aligned} t(k\,;\,n) &= \frac{4e^2 \omega_{kn}{}^3}{3\hbar c^3} |\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \\ &= \frac{4e^2 \omega_{kn}{}^3}{3\hbar c^3} \cdot \frac{3a_0{}^2}{4} \lim_{k_\alpha \to \infty} (k_\alpha - k_\beta)^2 \sigma(k_\beta \mathbf{e}_\alpha, k\,;\,k_\alpha \mathbf{e}_\alpha, n) \\ &= \frac{\hbar}{e^2 c^3} \omega_{kn}{}^5 \lim_{k_\alpha \to \infty} \frac{\sigma(k_\beta \mathbf{e}_\alpha, k\,;\,k_\alpha \mathbf{e}_\alpha, n)}{k_\alpha{}^2} \end{aligned} \tag{9}$$

で表わされることになる．

〔注〕 解答中で

$$|\mathbf{q} \cdot \langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \longrightarrow \tfrac{1}{3} q^2 |\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$$

なる置き換えを使った．もし最初の n 状態が磁気量子数の特定の方向への偏りをもたないならば，この移行は正確に成り立つ．ただしその場合，行列要素を上のように書いておいたのではあいまいである．実は各行列要素はすべて始状態の m_1 についての平均をとり，最終状態で可能な m_2 の値についての和をとったものとすることにすれば解答中の各式および結論に変わりのないことが示される．すなわち $\mathbf{e}$ を任意の単位ベクトル，$n = (n_1, l_1, m_1)$，$k = (n_2, l_2, m_2)$ として，

$$|\langle n_2 l_2|\mathbf{r}|n_1 l_1\rangle|^2 \equiv \frac{1}{2l_1+1} \sum_{m_1 m_2} \langle n_2 l_2 m_2|\mathbf{r}|n_1 l_1 m_1\rangle \cdot \langle n_1 l_1 m_1|\mathbf{r}|n_2 l_2 m_2\rangle \tag{10}$$

$$|\langle n_2 l_2|\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}|n_1 l_1\rangle|^2 \equiv \frac{1}{2l_1+1} \sum_{m_1 m_2} (\mathbf{e} \cdot \langle n_2 l_2 m_2|\mathbf{r}|n_1 l_1 m_1\rangle)(\mathbf{e} \cdot \langle n_1 l_1 m_1|\mathbf{r}|n_2 l_2 m_2\rangle) \tag{11}$$

と定義すれば

$$|\langle n_2 l_2|\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}|n_1 l_1\rangle|^2=\tfrac{1}{3}|\langle n_2 l_2|\mathbf{r}|n_1 l_1\rangle|^2 \tag{12}$$

が成立する．(12) は直観的には明らかであるが以下に証明を示す．そのため，問題VIII-3 の解答の注で導かれた式

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{l_2 m_2}(\theta,\phi)Y_{lm}(\theta,\phi)Y_{l_1 m_1}(\theta,\phi)\sin\theta\, d\theta\, d\phi$$
$$=\sqrt{\frac{(2l+1)(2l_1+1)}{4\pi(2l_2+1)}}\langle l_1 0, l0|l_2 0\rangle\langle l_1 m_1, lm|l_2 m_2\rangle \tag{13}$$

を使う．問題XI-8 の方法を一般化すると

$$\langle n_2 l_2 m_2|x|n_1 l_1 m_1\rangle=\langle n_2 l_2|r|n_1 l_1\rangle\sqrt{\frac{2l_1+1}{2l_2+1}}\langle l_1 0, 10|l_2 0\rangle$$
$$\times\left\{-\frac{1}{\sqrt{2}}\langle l_1 m_1, 11|l_2 m_2\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}\langle l_1 m_1, 1-1|l_2 m_2\rangle\right\}$$
$$\langle n_2 l_2 m_2|y|n_1 l_1 m_1\rangle=\langle n_2 l_2|r|n_1 l_1\rangle\sqrt{\frac{2l_1+1}{2l_2+1}}\langle l_1 0, 10|l_2 0\rangle \tag{14}$$
$$\times\left\{\frac{i}{\sqrt{2}}\langle l_1 m_1, 11|l_2 m_2\rangle+\frac{i}{\sqrt{2}}\langle l_1 m_1, 1-1|l_2 m_2\rangle\right\}$$
$$\langle n_2 l_2 m_2|z|n_1 l_1 m_1\rangle=\langle n_2 l_2|r|n_1 l_1\rangle\sqrt{\frac{2l_1+1}{2l_2+1}}\langle l_1 0, 10|l_2 0\rangle$$
$$\times\langle l_1 m_1, 10|l_2 m_2\rangle$$

が得られる．ただし

$$\langle n_2 l_2|r|n_1 l_1\rangle\equiv\int_0^\infty R_{n_2 l_2}(r)rR_{n_1 l_1}(r)r^2 dr$$

である．

これより (11) は

$$\frac{1}{2l_1+1}\sum_{m_1 m_2}|\mathbf{e}\cdot\langle n_2 l_2 m_2|\mathbf{r}|n_1 l_1 m_1\rangle|^2$$
$$=|\langle n_2 l_2|r|n_1 l_1\rangle|^2\frac{2l_1+1}{2l_2+1}|\langle l_1 0, 10|l_2 0\rangle|^2\frac{1}{2l_1+1}$$
$$\times\sum_{m_1 m_2}\left\{(|\langle l_1 m_1, 11|l_2 m_2\rangle|^2+|\langle l_1 m_1, 1-1|l_2 m_2\rangle|^2)\left(\frac{e_x^2+e_y^2}{2}\right)\right.$$
$$-(\langle l_1 m_1, 11|l_2 m_2\rangle\langle l_1 m_1, 1-1|l_2 m_2\rangle^*$$
$$+\langle l_1 m_1, 1-1|l_2 m_2\rangle\langle l_1 m_1, 11|l_2 m_2\rangle^*)\left(\frac{e_x^2-e_y^2}{2}\right)$$
$$\left.+|\langle l_1 m_1, 10|l_2 m_2\rangle|^2 e_z^2\right\}$$

となり，ここで Clebsch-Gordan 係数の性質

$$|\langle l_1m_1, 1m|l_2m_2\rangle|^2=\frac{2l_2+1}{3}|\langle l_1m_1, l_2-m_2|1-m\rangle|^2$$

および直交性

$$\sum_{m_1m_2}|\langle l_1m_1, l_2-m_2|1-m\rangle|^2=\langle 1-m|1-m\rangle=1$$

$$\sum_{m_2}\langle l_1m_1, 11|l_2m_2\rangle\langle l_1m_1, 1-1|l_2m_2\rangle^*=0$$

を用いると

$$\sum_{m_1, m_2}|\langle l_1m_1, 1m|l_2m_2\rangle|^2=\frac{2l_2+1}{3}\qquad m=0,\ \pm1$$

他は零となるので，$e_x^2+e_y^2+e_z^2=\mathbf{e}^2=1$ を考慮すると

$$\frac{1}{2l_1+1}\sum_{m_1, m_2}|\mathbf{e}\cdot\langle n_2l_2m_2|\mathbf{r}|n_1l_1m_1\rangle|^2$$
$$=\tfrac{1}{3}|\langle n_2l_2|r|n_1l_1\rangle|^2\times|\langle l_1 0, 10|l_20\rangle|^2 \tag{15}$$

が得られる．他方

$$\frac{1}{2l_1+1}\sum_{m_1, m_2}|\langle n_2l_2m_2|\mathbf{r}|n_1l_1m_1\rangle|^2$$
$$=|\langle n_2l_2|r|n_1l_1\rangle|^2\frac{2l_1+1}{2l_2+1}|\langle l_10, 10|l_20\rangle|^2\frac{1}{2l_1+1}$$
$$\times\sum_{m_1, m_2}\sum_{m=0, \pm1}|\langle l_1m_1, 1m|l_2m_2\rangle|^2$$

ここで

$$\sum_{m_1, m}|\langle l_1m_1, 1m|l_2m_2\rangle|^2=\langle l_2m_2|l_2m_2\rangle=1$$

に注意すると

$$\frac{1}{2l_1+1}\sum_{m_1, m_2}|\langle n_2l_2m_2|\mathbf{r}|n_1l_1m_1\rangle|^2$$
$$=|\langle n_2l_2|r|n_1l_1\rangle|^2\times|\langle l_10, 10|l_20\rangle|^2 \tag{16}$$

が得られる．(15)，(16) より (12) が成立することが示された．

以上の結果より，解答中に現われたすべての量を，始状態の m_1 については平均をとり，終状態の m_2 については和をとったもので置き換えれば結論に変更はない．

問題XI-11　［第2版，X-問11と同一］

輻射強度に対する（45.12）［36.12］の表式を使って $J_{0y}=iJ_{0x}$，$J_{0z}=0$ の場合の輻射の角分布を求めよ．また輻射された全パワーはこの場合もやはり（45.13）［36.13］式で与えられることを示せ．

〔解〕 電気双極子近似のもとでのエネルギー流束に対する式（45.12）［36.12］は

$$\frac{k^2}{2\pi r^2 c}\left|\int J_{\perp\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d^3r'\right|^2 \tag{1}$$

で与えられる．$\mathbf{k}$ と x, y, z 軸とのなす角をそれぞれ $\theta_x, \theta_y, \theta_z$ とすれば

$$J_{\perp\mathbf{k}}(\mathbf{r}')=J_x(\mathbf{r}')\sin\theta_x+J_y(\mathbf{r}')\sin\theta_y+J_z(\mathbf{r}')\sin\theta_z$$

である．したがって

$$\begin{aligned}\int J_{\perp\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d^3r' &= \int[J_x(\mathbf{r}')\sin\theta_x+J_y(\mathbf{r}')\sin\theta_y+J_z(\mathbf{r}')\sin\theta_z]d^3r' \\ &= \sin\theta_x\int J_x(\mathbf{r}')d^3r'+\sin\theta_y\int J_y(\mathbf{r}')d^3r'+\sin\theta_z\int J_z(\mathbf{r}')d^3r' \\ &= J_{0x}\sin\theta_x+J_{0y}\sin\theta_y+J_{0z}\sin\theta_z\end{aligned}$$

ここで与えられた条件 $J_{0y}=iJ_{0x}$，$J_{0z}=0$ を使うと

$$\int J_{\perp\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d^3r'=J_{0x}(\sin\theta_x+i\sin\theta_y)$$

これより

$$\begin{aligned}\left|\int J_{\perp\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d^3r'\right|^2 &= |J_{0x}|^2(\sin^2\theta_x+\sin^2\theta_y) \\ &= |J_{0x}|^2(2-\cos^2\theta_x-\cos^2\theta_y)\end{aligned}$$

となる．ここで球座標を導入し $\mathbf{k}$ が

$$\mathbf{k}=(k_x, k_y, k_z)=(k\sin\theta\cos\phi, k\sin\theta\sin\phi, k\cos\theta)$$

とあらわされたとすれば，$\cos\theta_x=\sin\theta\cos\phi, \cos\theta_y=\sin\theta\sin\phi$ なので

$$|J_{0x}|^2(2-\cos^2\theta_x-\cos^2\theta_y)=|J_{0x}|^2(1+\cos^2\theta)$$

となる．これと最初の式よりエネルギー流束は

$$\frac{k^2}{2\pi r^2 c}|J_{0x}|^2(1+\cos^2\theta) \tag{2}$$

という角分布を示す．すなわちエネルギーは xy 平面に垂直な方向に強く放射される．

また全パワーは，ある距離 r の球面上で上のエネルギー流束を角度について積分することにより得られ

$$\int \frac{k^2}{2\pi r^2 c}|J_{0x}|^2(1+\cos^2\theta)r^2\sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$=\frac{4k^2}{3c}\cdot 2|J_{0x}|^2$$

$$=\frac{4k^2}{3c}|\mathbf{J}_0|^2 \tag{3}$$

ただし最後の式の移行に際して

$$|\mathbf{J}_0|^2=|J_{0x}|^2+|J_{0y}|^2+|J_{0z}|^2=|J_{0x}|^2+|iJ_{0x}|^2+0=2|J_{0x}|^2$$

であることを使った.（3）の結果は（45.13）[36.13] に他ならないので，この場合にも全パワーに対する式の形は変わらないことが示された.

問題XI-12 ［第3版］

水素原子の遷移に対しては，（44.19）[35.19] の $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ は $e^2/\hbar c\approx\frac{1}{137}$ のオーダーになることを示せ.

〔解〕（44.19）[35.19] の $\mathbf{k},\mathbf{r}$ において

$$|\mathbf{k}|=\frac{\omega_{kn}}{c}=\frac{1}{c\hbar}(E_k-E_n)$$

$$E_n=-\frac{e^2}{2a_0n^2}$$

したがって

$$|\mathbf{k}|\sim\frac{e^2}{c\hbar a_0}$$

また

$$|\mathbf{r}|\sim a_0$$

これより

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\sim\frac{e^2}{c\hbar a_0}\cdot a_0=\frac{e^2}{c\hbar}=\frac{1}{137}$$

である.

問題XI-13　［第2版，X-問14と同一］

重陽子を構成している陽子と中性子との間の相互作用が $a=0$（すなわち作用距離が0，いいかえれば δ- 関数型の相互作用）の四角な井戸型ポテンシャルで表わすことができかつこの系の唯一の束縛されたエネルギー準位は $l=0$, $\epsilon=2.23$ Mev.（million electron volts）のものであると仮定せよ．光分解の断面積の計算において終状態の波動関数を平面波とみなしても誤りがないことを示せ．また，偏りのない光子による光分解の微分断面積と全断面積を求めよ．

〔解〕 光分解に対する遷移の行列要素としては (46.4) [37.16] が使える．ただし u_0 としては陽子中性子系の $l=0$, $\epsilon=2.23$ Mev の束縛状態をとり，終状態 u_k は §38-4 [§37-12] に説明されている DWBA による近似を適用すれば，摂動のないハミルトニアンの解で〈平面波＋内向きの球面波〉の形をしたものを採用すればよいことになる．

さて陽子，中性子の系において，§16-1 ［ 〃 ］と同様にして重心座標を分離すれば，相対運動に対する Schrödinger の波動方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 u+Vu=Eu, \qquad \mu=\frac{m_p m_n}{m_p+m_n} \tag{1}$$

となる．ここでポテンシャルVは

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & (r<a)\\ 0 & (r>a)\end{cases}$$

であるが，この系の唯一つの束縛状態のエネルギー準位が $|E|=\epsilon=2.23$ Mev となるように $a\to 0$ の極限をとるものとする．

$l=0$ に対する方程式（1）の解は（15.2）［ 〃 ］で与えられるが，$a\to 0$ の極限を考えることにより，解は

$$u_0(r)=C\frac{e^{-\beta r}}{r} \quad (r>0), \qquad \beta=\sqrt{\frac{2\mu\epsilon}{\hbar^2}} \tag{2}$$

となる．規格化条件

$$\int|u_0(r)|^2 d^3r=4\pi\int_0^\infty|u_0(r)|^2 r^2 dr\equiv 4\pi\lim_{\varepsilon\to 0}\int_\varepsilon^\infty|u_0(r)|^2 r^2 dr=1$$

より

$$C=\sqrt{\frac{2\beta}{4\pi}}$$

が得られる．

次に散乱波を表わす解に移る．散乱波の解を Legendre の多項式で展開した式は (19.1)［〃］*) で与えられ θ を平面波の進行方向と散乱波の進行方向とのなす角とすると

$$u(r,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l R_l(r)P_l(\cos\theta) \qquad (3)$$

である．a 有限のとき部分波の波動関数 $R_l(r)$ は

$$R_l(r)=e^{i\delta_l}[\cos\delta_l j_l(kr)-\sin\delta_l n_l(kr)] \qquad (4)$$

であり，位相のずれは問題V-7の（1）により

$$\tan\delta_l=\frac{\sqrt{\eta^2+(ka)^2}j_{l-1}(\sqrt{\eta^2+(ka)^2})j_l(ka)-kaj_{l-1}(ka)j_l(\sqrt{\eta^2+(ka)^2})}{\sqrt{\eta^2+(ka)^2}j_{l-1}(\sqrt{\eta^2+(ka)^2})n_l(ka)-kan_{l-1}(ka)j_l(\sqrt{\eta^2+(ka)^2})}$$

で与えられる．ただし

$$\sqrt{\frac{2\mu V_0a^2}{\hbar^2}}=\eta, \qquad \sqrt{\frac{2\mu Ea^2}{\hbar^2}}=ka$$

である．$a\to 0$ で $l=0$ に唯一つの束縛状態が存在するためには

$$\lim_{a\to 0}\eta=\frac{\pi}{2}$$

でなければならぬことがわかる．したがって k を有限として $a\to 0$ のとき

$$\lim_{a\to 0}\tan\delta_0=\lim_{a\to 0}\frac{2}{ka}=\infty$$

$$\lim_{a\to 0}\tan\delta_l=\lim_{a\to 0}\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!\,(2l-1)!!}=0 \qquad (l\geqq 1)$$

であるから

$$\delta_0(k)=\frac{\pi}{2}, \qquad \delta_l(k)=0 \quad (l\geqq 1), \qquad k \text{ 有限} \qquad (5)$$

となる．これより部分波の波動関数 $R_l(r)$ は

$$R_0(r)=-in_0(kr), \qquad R_l(r)=j_l(kr) \quad (l\geqq 1) \qquad (6)$$

---

*)　第2版の［19.1］における $R_l(r)$ は（3）の $(2l+1)i^lR_l(r)$ 全体に相当する．したがって以下の式でもここでの $R_l(r)$ は第2版の $R_l(r)$ から係数 $(2l+1)i^l$ をくくりだした残りをあらわす．

となるので散乱波（3）は

$$u(\mathbf{r})=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l R_l(r)P_l(\cos\theta)$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta)-in_0(kr)-j_0(kr)$$

$$=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+i\frac{e^{ikr}}{kr} \qquad (7)$$

で与えられることになる．ここで DWBA 近似による波動関数（38.8）に移行すれば，結局終状態の波動関数は

$$u_k(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}-i\frac{e^{-ikr}}{kr} \qquad (8)$$

となることがわかる．これから行列要素（46.4）[37.16] の積分は

$$\int u_k{}^* e^{i\omega z/c}A_0\left(\frac{\partial u_0}{\partial x}\right)d^3r$$

$$=\int\left[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+i\frac{e^{ikr}}{kr}\right]e^{i\omega z/c}A_0\frac{\partial}{\partial x}\left(\sqrt{\frac{2\beta}{4\pi}}\frac{e^{-\beta r}}{r}\right)d^3r$$

となる．このうち積分

$$\int\frac{i}{kr}e^{ikr}e^{i\omega z/c}A_0\frac{\partial}{\partial x}\left(\sqrt{\frac{2\beta}{4\pi}}\frac{e^{-\beta r}}{r}\right)d^3r$$

は x についての奇関数だから零である[注]．したがって

$$\int u_k{}^* e^{i\omega z/c}A_0\left(\frac{\partial u_0}{\partial x}\right)d^3r=\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{i\omega z/c}A_0\frac{\partial}{\partial x}\left(\sqrt{\frac{2\beta}{4\pi}}\frac{e^{-\beta r}}{r}\right)d^3r \qquad (9)$$

が正確に成り立つので終状態の波動関数を最初から平面波とみなしても誤りがないことが示された．

以上のことから x 軸方向に偏った z 軸方向に進行する光による光分解の断面積は（46.6）[37.18]

$$\sigma(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi=\frac{e^2kk_x{}^2}{2\pi\mu c\omega}\left|\int u_0\exp(i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r})d^3r\right|^2\sin\theta\,d\theta\,d\phi \qquad (10)$$

$$\mathbf{K}=\frac{\omega}{c}\mathbf{1}_z-\mathbf{k},\qquad \mathbf{1}_z \text{ は } z \text{ 軸方向の単位ベクトル}$$

で与えられる．入射光子が xy 平面内で x 軸方向と角 α をなす方向に偏っている場合には，x 軸方向に偏った光は $A_0\to A_0\cos\alpha$ と置き換えてやればよいが，y 軸方向に偏った光も入ってくるので両者による断面積の和より，結局上式の $k_x{}^2$ を

$$k_x{}^2 \to k_x{}^2 \cos^2\alpha + k_y{}^2 \sin^2\alpha$$

で置き換えてやればよいことになる．したがって入射光子に偏りのない場合にはこれをαについて平均することにより本文にあるように係数

$$\tfrac{1}{2}(k_x{}^2+k_y{}^2)=\tfrac{1}{2}k^2\sin^2\theta$$

をうる．ただしθはz軸と散乱方向のなす角である．

これより偏りのない光による光分解の微分断面積は

$$\begin{aligned}
&\sigma(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi\\
&=\frac{e^2k}{2\pi\mu c\omega}\tfrac{1}{2}k^2\sin^2\theta\left|\int\sqrt{\frac{2\beta}{4\pi}}\frac{e^{-\beta r}}{r}\cdot e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}d^3r\right|^2\sin\theta\,d\theta\,d\phi\\
&=\frac{e^2k}{2\pi\mu c\omega}\tfrac{1}{2}k^2\sin^2\theta\left|\sqrt{\frac{2\beta}{4\pi}}\frac{4\pi}{\beta^2+K^2}\right|^2\sin\theta\,d\theta\,d\phi\\
&=\frac{2e^2k^3\beta}{\mu c\omega}\frac{\sin^2\theta}{\left[\left(\dfrac{\omega}{c}\right)^2+\dfrac{2\mu\omega}{\hbar}-2\dfrac{\omega}{c}k\cos\theta\right]^2}\sin\theta\,d\theta\,d\phi\\
&=\frac{2e^2k^3\beta}{\mu c\omega}\frac{1}{\omega^2}\cdot\left(\frac{\hbar}{2\mu}\right)^2\frac{\sin^2\theta}{\left[\dfrac{\hbar\omega}{2\mu c^2}+1-\dfrac{v}{c}\cos\theta\right]^2}\sin\theta\,d\theta\,d\phi \qquad (11)
\end{aligned}$$

ここで

$$K^2=\left(\frac{\omega}{c}\right)^2+k^2-2\frac{\omega}{c}k\cos\theta,\qquad \beta^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}\epsilon,\qquad \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}=\hbar\omega-\epsilon$$

を使った．

vは重心系での陽子中性子の相対運動の速さであるからv/cは非相対論では相当に小さい．また$2\mu c^2$はおよそ陽子または中性子の静止エネルギー程度の大きさ（～940 Mev）であり，$\hbar\omega$は光分解を起こす光のエネルギーだからこれにくらべ小さい．したがってここで近似を行なうと（11）は

$$\sigma(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi\approx\frac{2e^2k^3\beta}{\mu c\omega^3}\left(\frac{\hbar}{2\mu}\right)^2\sin^2\theta\left(1+2\frac{v}{c}\cos\theta\right)\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

となるのでこれより全断面積

$$\begin{aligned}
\sigma&=\iint\sigma(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi\\
&\approx\frac{2e^2k^3\beta}{\mu c\omega^3}\left(\frac{\hbar}{2\mu}\right)^2\iint\sin^2\theta\left(1+2\frac{v}{c}\cos\theta\right)\sin\theta\,d\theta\,d\phi
\end{aligned}$$

$$=\frac{2e^2k^3\beta}{\mu c\omega^3}\left(\frac{\hbar}{2\mu}\right)^2 2\pi\cdot\frac{2}{3}$$

$$=\frac{2}{3}\pi\frac{\hbar^2 e^2 k^3}{\mu^3 c\omega^3}\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}\epsilon},\qquad \epsilon=2.23\,\mathrm{Mev}$$

が得られる.

〔注〕

$$\int\frac{1}{r}e^{ikr}e^{i\omega z/c}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{e^{-\beta r}}{r}\right)d^3\boldsymbol{r}$$

$$=-\int e^{ikr}e^{i\omega r\cos\theta/c}(1+\beta r)\frac{1}{r^3}e^{-\beta r}\sin\theta\cos\phi\cdot r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$$

であるから，この積分は ϕ についての積分より零となることがわかる．ところで，r についての積分は $r=0$ の付近で発散するが，このとき上の積分はある小さな正の値 ε を使って

$$\int_{r>\varepsilon}\frac{1}{r}e^{ikr}e^{i\omega z/c}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{e^{-\beta r}}{r}\right)d^3\boldsymbol{r}$$

と解釈しておけばやはり結論は変わらない．ε はたとえばこの場合はポテンシャルの半径 a 程度にとっておき，$a\to 0$ の極限で $\varepsilon\to 0$ ととることにしておけばよい．

第 XII 章

原子・分子・原子核

問題XII-1　［第2版，XI-問1と同一］

Thomas-Fermi モデルでの電子密度 $n(r)$ に対する表式をディメンジョンのない関数 χ を使って求め，さらに，全電子の一定の割合を含む球の半径が $Z^{-\frac{1}{3}}$ に比例することを示せ．

〔**解**〕 $n(r)$ は (47.1) [38.1]，(47.4) [38.4] より x, χ を使って表わすと

$$n(r)=\frac{[-2mV(r)]^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3}=\frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left[2m\frac{Ze^2}{bx}\chi\right]^{\frac{3}{2}}$$

$$=\frac{Z}{4\pi}\left[\left(\frac{4}{3\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{2me^2Z^{\frac{1}{3}}}{\hbar^2}\frac{1}{b}\frac{\chi}{x}\right]^{\frac{3}{2}}$$

$$=\frac{Z}{4\pi}\left(\frac{1}{b^2}\frac{\chi}{x}\right)^{\frac{3}{2}}=\frac{Z}{4\pi b^3}\left(\frac{\chi}{x}\right)^{\frac{3}{2}}$$

ここで

$$r=bx, \qquad b=\frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{\hbar^2}{me^2Z^{\frac{1}{3}}}=\frac{0.885a_0}{Z^{\frac{1}{3}}} \tag{1}$$

である．

“原子の半径” を a とおくと，半径 a の球内に含まれている電子の総数は

$$\int_{r<a}n(r)d^3r=\int_0^a n(r)4\pi r^2\,dr$$

$$=\int_0^{a/b}\frac{Z}{4\pi b^3}\left(\frac{\chi}{x}\right)^{\frac{3}{2}}4\pi b^2x^2b\,dx$$

$$=Z\int_0^{a/b}x^{\frac{1}{2}}\chi^{\frac{3}{2}}\,dx$$

ところで原子の半径 a は，その半径の球内に含まれている電子の数が原子に属している総電子数のある一定の割合である，ということで定義されるものとすれば，

$$Z\int_0^{a/b}x^{\frac{1}{2}}\chi^{\frac{3}{2}}\,dx=kZ \qquad k\text{ は定数，}\ 0<k<1.$$

とおくことができる．これより

$$\int_0^{a/b} x^{\frac{1}{2}}\chi^{\frac{3}{2}}\,dx=k \tag{2}$$

が得られる．ところで χ, k はZに無関係なので，（2）の積分の上限 a/b もZによらぬ定数でなければならぬことになる．すなわち，aはbに，したがって $Z^{-\frac{1}{3}}$ に比例する．

問題XII-2　［第2版，XI-問2と同一］

Lagrange の未定乗数の方法を使って，uが規格化されたままで変化させられたときの積分（47.9）[38.9] が停留値をとる条件は（47.11）[38.11] で与えられることを示せ．

〔**解**〕 問題は，各エネルギーの固有関数が規格化されているという要請を表わす条件

$$\int |u_k|^2 d^3r_k=\int u_k^*(\mathbf{r}_k)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_k=1, \qquad k=1,2,\cdots,Z$$

のもとに（47.9）[38.9]

$$\int\cdots\int \psi^* H\psi\, d^3r_1\cdots d^3r_Z$$

$$=\sum_k\int u_k^*(\mathbf{r}_k)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2-\frac{Ze^2}{r_k}\right)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_k$$

$$+\sum_{j>k}\sum\iint u_j^*(\mathbf{r}_j)u_k^*(\mathbf{r}_k)\frac{e^2}{r_{jk}}u_j(\mathbf{r}_j)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_j\,d^3r_k$$

が停留値をとる条件を求めるのだが，ラグランジュの未定乗数 $\varepsilon_k(k=1,2,\cdots,Z)$ を導入すれば，これは

$$I=\int\cdots\int\psi^*H\psi\,d^3r_1\cdots d^3r_Z-\sum_k\varepsilon_k\int u_k^*(\mathbf{r}_k)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_k$$

の変分が零となる条件を調べることにより求まる．すなわち

$$\delta I=\delta\left[\int\cdots\int\psi^*H\psi\,d^3r_1\cdots d^3r_Z-\sum_k\varepsilon_k\int u_k^*(\mathbf{r}_k)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_k\right]$$

$$=\delta\left[\sum_k\int u_k^*(\mathbf{r}_k)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2-\frac{Ze^2}{r_k}\right)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_k\right.$$

$$+\sum_{j>k}\sum\iint u_j^*(\mathbf{r}_j)u_k^*(\mathbf{r}_k)\frac{e^2}{r_{jk}}u_j(\mathbf{r}_j)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_j\,d^3r_k$$

$$-\sum_k \varepsilon_k \int u_k^*(\mathbf{r}_k) u_k(\mathbf{r}_k) d^3r_k \Big]$$

$$=0$$

が必要である．いま $u_k(\mathbf{r}_k)$ に $\delta u_k(\mathbf{r}_k)$ したがって同時に $u_k^*(\mathbf{r}_k)$ に $\delta u_k^*(\mathbf{r}_k)$ の変分を与えれば，

$$\begin{aligned}
\delta I = & \Big[\int \delta u_k^*(\mathbf{r}_k)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{r_k}\right) u_k(\mathbf{r}_k) d^3r_k \\
& + \sum_{j\neq k} \iint \delta u_k^*(\mathbf{r}_k) |u_j(r_j)|^2 \frac{e^2}{r_{jk}} u_k(\mathbf{r}_k) d^3r_j d^3r_k - \varepsilon_k \int \delta u_k^*(\mathbf{r}_k) u_k(\mathbf{r}_k) d^3r_k \Big] \\
& + \Big[\int \delta u_k(\mathbf{r}_k)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{r_k}\right) u_k^*(\mathbf{r}_k) d^3r_k \\
& + \sum_{j\neq k} \iint \delta u_k(\mathbf{r}_k) |u_j(\mathbf{r}_j)|^2 \frac{e^2}{r_{jk}} u_k^*(\mathbf{r}_k) d^3r_j d^3r_k - \varepsilon_k \int \delta u_k(\mathbf{r}_k) u_k^*(\mathbf{r}_k) d^3r_k \Big] \\
= & \int \delta u_k^*(\mathbf{r}_k) \Big[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{r_k}\right) + \sum_{j\neq k} \int |u_j(\mathbf{r}_j)|^2 \frac{e^2}{r_{jk}} d^3r_j - \varepsilon_k \Big] u_k(\mathbf{r}_k) d^3r_k \\
& + \int \delta u_k(\mathbf{r}_k) \Big[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{r_k}\right) + \sum_{j\neq k} \int |u_j(\mathbf{r}_j)|^2 \frac{e^2}{r_{jk}} d^3r_j - \varepsilon_k \Big] u_k^*(\mathbf{r}_k) d^3r_k \\
= & \int \delta u_k^*(\mathbf{r}_k) [H_k - \varepsilon_k] u_k(\mathbf{r}_k) d^3r_k + \int \delta u_k(\mathbf{r}_k) [H_k - \varepsilon_k] u_k^*(\mathbf{r}_k) d^3r_k \\
= & 0
\end{aligned}$$

なる条件式が得られる．ただし上式 3 行目で実は

$$\int u_k^*(\mathbf{r}_k) \delta[\nabla_k^2 u_k(\mathbf{r}_k)] d^3r_k$$

なる式が現われるが，変分と微分演算とが可換であること，および部分積分を使って

$$\int u_k^*(\mathbf{r}_k) \nabla_k^2 \delta u_k(\mathbf{r}_k) = \int \delta u_k(\mathbf{r}_k) \nabla_k^2 u_k^*(\mathbf{r}_k) d^3r$$

としてある．

さて変分 δu_k はその実数部分，および虚数部分に対する変分からなり

$$\delta u_k = \delta u_{kR} + i\delta u_{kI}$$

であるが，δu_{kR}，および δu_{kI} がそれぞれ任意であるので，δu_k と δu_k^* が形式的には独立な変分とみなしたと同じ結果が得られる．したがって δu_k，δu_k^* の係数がそれぞれ零でなければならないので

$$H_k u_k(\mathbf{r}_k) = \varepsilon_k u_k(\mathbf{r}_k)$$
$$H_k u_k^*(\mathbf{r}_k) = \varepsilon_k u_k^*(\mathbf{r}_k)$$

ただし

$$H_k \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j\neq k}\int |u_j(\mathbf{r}_j)|^2 \frac{e^2}{r_{jk}} d^3r_j$$

および

$$\int |u_k(\mathbf{r}_k)|^2 d^3r_k = 1$$

が得られる．この式は（47.6）[38.6] または（47.11）[38.11] と同じものである．

問題XII-3　［第2版，XI-問3と同一］

二個の p 電子（$l=1$）は Russell-Saunders 結合の場合は $L=0,1,2$ および $S=0,1$ をとりうる．二個の電子の n の値が異なる場合，L および S のこれらの値のすべての組合せが許されるか？，また，n の値が同じであるとき，これらはすべて許されるか？

〔解〕 Russell-Saunders 結合では，L および S が状態を記述するのにほぼよい量子数とみなせる（§47-8 [§38.8]）2電子系では $\mathbf{L}=\mathbf{L}_1+\mathbf{L}_2$，$\mathbf{S}=\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2$ だから現われうる L, S は $L=0,1,2$，$S=0,1$ したがって起こりうる組合わせは6通りであり，それぞれの組合せが許されるかどうかは §40-6 [§32.5] の Pauli 排他律を考慮して，2電子の入れ換えに対して完全反対称な波動関数を構成しうるかどうかをみればよい．

（n が異なる場合）

2電子がことなる状態にあれば，それぞれの電子の $\mathbf{L}, \mathbf{S}$ の状態が何であっても，2電子の状態が一致することはないのですべての組合わせが許される．各 L, S の組合せに含まれる状態の数，および対応して現われる $LSJM$ の表記による状態は（47.16）[38.16] 以下の説明より次のようになる．

L	S	状態の数 $(2L+1)(2S+1)$	${}^{2S+1}L_J$	
2	1	15	${}^3D_3, {}^3D_2, {}^3D_1$	
2	0	5	${}^1D_2$	
1	1	9	${}^3P_2, {}^3P_1, {}^3P_0$	(1)

1	0	3	$^1P_1$
0	1	3	$^3S_1$
0	0	1	$^1S_0$

（n が同じ場合）

この場合は，各々の場合に，対応する空間部分，スピン部分の関数の対称性から全波動関数の対称性が得られる〔注〕．2電子の入れ換えに対する対称，反対称を＋－であらわすと，

L	S	空間部分	スピン部分	全波動関数	
2	1	＋	＋	＋	（禁止）
2	0	＋	－	－	
1	1	－	＋	－	
1	0	－	－	＋	（禁止）
0	1	＋	＋	＋	（禁止）
0	0	＋	－	－	

（2）

となり，（1）の各状態のうち許されるのは（1）より $^1D_2, {}^3P_2, {}^3P_1, {}^3P_0, {}^1S_0$ に対応する合計15通りである．

〔注〕 2電子系のスピン波動関数の対称性は（41.6）[33.6] で与えられる通りである．n が同じで各電子が $l=1$ の場合の空間部分の波動関数はそれぞれの電子に対して

$$u_{n,1,m_1}(\mathbf{r}_1)=R_{n1}(\mathbf{r}_1)Y_{1m_1}(\theta_1, \phi_1)$$

$$u_{n,1,m_2}(\mathbf{r}_2)=R_{n1}(\mathbf{r}_2)Y_{1m_2}(\theta_2, \phi_2)$$

で与えられるが，動径部分の波動関数が同じなので，空間部分の波動関数の積 $u_{n,1,m_1}(\mathbf{r}_1)u_{n,1,m_2}(\mathbf{r}_2)$ から対称操作によって得られる関数の対称性は角部分の関数の対称性によって決定される．式（28.1）：

$$|jm\rangle=|m_1m_2\rangle\langle m_1m_2|jm\rangle$$

および $j_1=j_2=1$ の場合の Clebsch-Gordan 係数の値（28.14）を使って合成された空間部分の波動関数は共通部分

$$R_{n1}(\mathbf{r}_1)R_{n2}(\mathbf{r}_2)$$

を除いて次のように与えられ，これより空間部分の対称性が決定される．すなわち

L	M	
2	2	$Y_{11}(1)Y_{11}(2)$

2	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}[Y_{10}(1)Y_{11}(2)+Y_{11}(1)Y_{10}(2)]$
2	0	$\frac{1}{\sqrt{6}}[Y_{11}(1)Y_{1-1}(2)+2Y_{10}(1)Y_{10}(2)+Y_{1-1}(1)Y_{11}(2)]$
2	−1	$\frac{1}{\sqrt{2}}[Y_{1-1}(1)Y_{10}(2)+Y_{10}(1)Y_{1-1}(2)]$
2	−2	$Y_{1-1}(1)Y_{1-1}(2)$
1	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}[Y_{11}(1)Y_{10}(2)-Y_{10}(1)Y_{11}(2)]$
1	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}[Y_{11}(1)Y_{1-1}(2)-Y_{1-1}(1)Y_{11}(2)]$
1	−1	$\frac{1}{\sqrt{2}}[Y_{10}(1)Y_{1-1}(2)-Y_{1-1}(1)Y_{10}(2)]$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}[Y_{11}(1)Y_{1-1}(2)-Y_{10}(1)Y_{10}(2)+Y_{1-1}(1)Y_{11}(2)]$

となり，一電子のときと同称 $L=0,2$ は対称，$L=1$ は反対称である．

問題XII-4　［第2版，XI-問4と同一］

Russell-Saunders 結合の場合のスピン波動関数は，全スピン量子数 S の値が異なった $\mathbf{S}^2$ の固有関数になっていれば互いに直交することを示せ．この際 §10 で異なった固有値に対応するエネルギー固有関数が直交することを示すのに使われたものと似た方法を使え．

〔**解**〕 N 個の電子に対するスピン波動関数で $\mathbf{S}^2$ の固有関数になっているものを ϕ_1, ϕ_2 とし

$$\mathbf{S}^2\phi_1=s_1(s_1+1)\hbar^2\phi_1$$

$$\mathbf{S}^2\phi_2=s_2(s_2+1)\hbar^2\phi_2$$

であるとする．これより

$$(\phi_2, \mathbf{S}^2\phi_1)-(\mathbf{S}^2\phi_2, \phi_1)=\{s_1(s_1+1)-s_2(s_2+1)\}\hbar^2(\phi_2, \phi_1) \qquad (1)$$

が成立する．ここで $\mathbf{S}^2=(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\cdots+\mathbf{S}_N)^2$ であり各スピン演算子 $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \cdots, \mathbf{S}_N$ がエルミット演算子なので $\mathbf{S}^2$ もエルミット演算子であり，したがって

$$(\mathbf{S}^2\phi_2, \phi_1)=(\phi_2, \mathbf{S}^2\phi_1)$$

より，（1）の左辺は零となる．ゆえに

$$\{s_1(s_1+1)-s_2(s_2+1)\}(\phi_2, \phi_1)=0$$

であるが，$s_1 \geqq 0$, $s_2 \geqq 0$ だから，$s_1 \neq s_2$ ならば

$$(\phi_2, \phi_1)=0$$

でなければならない．

問題XII-5 ［第2版，XI-問5と同一］

直接計算によって，$\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ は $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ と，したがってまた(48.1)［39.1］のハミルトニアンと可換であることを示せ．

〔**解**〕 $\mathbf{L}$ と $\mathbf{S}$ とは可換である．また $\mathbf{L}, \mathbf{S}$ の交換関係は一般に

$$[L_i, L_j]=i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} L_k$$

$$[S_i, S_j]=i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} S_k$$

で与えられる．ただしここで添字 x, y, z をそれぞれ 1, 2, 3 と書き換え，また ϵ_{ijk} は(27.39)で与えられ

$$\epsilon_{123}=\epsilon_{231}=\epsilon_{312}=-\epsilon_{132}=-\epsilon_{321}=-\epsilon_{213}=1$$

としてある．これより

$$\begin{aligned}
[L_i+S_i, \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}]&=[L_i, \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}]+[S_i, \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}]\\
&=\sum_j [L_i, L_j]S_j+\sum_j L_j[S_i, S_j]\\
&=\sum_j \left(i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk}L_k\right)S_j+\sum_j L_j\left(i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk}S_k\right)\\
&=i\hbar \sum_j \sum_k \epsilon_{ijk}L_k S_j+i\hbar \sum_j \sum_k \epsilon_{ijk}L_j S_k
\end{aligned}$$

ここで第2項で和をあらわす添字 j, k をつけ替えて

$$=i\hbar \sum_j \sum_k \epsilon_{ijk}L_k S_j+i\hbar \sum_j \sum_k \epsilon_{ikj}L_k S_j$$

さらに $\epsilon_{ikj}=-\epsilon_{ijk}$ を使って

$$\begin{aligned}
&=i\hbar \sum_j \sum_k \epsilon_{ijk}L_k S_j-i\hbar \sum_j \sum_k \epsilon_{ijk}L_k S_j\\
&=0
\end{aligned}$$

したがって

$$[\mathbf{L}+\mathbf{S}, \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}]=0$$

が成立する．ハミルトニアンの残りの部分は

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)$$

であるが，$\mathbf{S}$ は空間座標に無関係だから

$$[\mathbf{S}, H_0]=0$$

が成立し，また H_0 は回転に対し不変な形をしているので

$$[\mathbf{L}, H_0]=0$$

したがって $\mathbf{L}+\mathbf{S}$ はハミルトニアン (48.1) [39.1]

$$H=H_0+\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)+\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$$

と可換である．

問題XII-6　[第2版，XI-問7と同一]

10^5 gauss の磁場内にある水素原子の場合について，(48.9) [39.9] の H について一次の項と運動エネルギーの項との比を算出せよ．

〔解〕 磁場の方向を z 軸方向にとり

$$\mathsf{\mathbf{H}}=(0,0,\mathsf{H})$$

とする．

$$\langle nlm|\mathsf{\mathbf{H}}\cdot\mathbf{L}|nlm\rangle=\langle nlm|\mathsf{H}L_z|nlm\rangle$$

$$=\mathsf{H}m\hbar\langle nlm|nlm\rangle=\mathsf{H}m\hbar$$

であるので

$$\left\langle\frac{e}{2\mu c}\mathsf{\mathbf{H}}\cdot\mathbf{L}\right\rangle=\left\langle nlm\left|\frac{e}{2\mu c}\mathsf{\mathbf{H}}\cdot\mathbf{L}\right|nlm\right\rangle=\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathsf{H}m$$

が得られる．一方

$$\langle T\rangle=\left\langle-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\right\rangle=\left\langle nlm\left|-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\right|nlm\right\rangle$$

であるが，ここで問題IV-13の結果を使えば

$$=\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2},\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

$$=\frac{Z^2e^2}{2n^2}\frac{\mu e^2}{\hbar^2}$$

$$=\frac{\mu Z^2e^4}{2\hbar^2n^2}$$

したがって $Z=1$ とおいて

$$\frac{\left\langle\dfrac{e}{2\mu c}\mathbf{H}\cdot\mathbf{L}\right\rangle}{\langle T\rangle}=\frac{\dfrac{e\hbar}{2\mu c}\mathsf{H}m}{\dfrac{e^2}{2a_0n^2}}$$

$$=2a_0\left(\frac{e\hbar}{2\mu c}\right)\frac{1}{e^2}\mathsf{H}n^2m$$

ここで

$$a_0=5.29\times10^{-9}\,\mathrm{cm}$$

$$\frac{e\hbar}{2\mu c}=0.927\times10^{-20}\,\mathrm{erg/oersted}$$

$$e=4.80\times10^{-10}\,\mathrm{esu}$$

$$\mathsf{H}=10^5\,\mathrm{gauss}$$

を代入すると

$$\frac{\left\langle\dfrac{e}{2\mu c}\mathbf{H}\cdot\mathbf{L}\right\rangle}{\langle T\rangle}\simeq4.3\times10^{-5}n^2m$$

問題XII-7 ［第3版］

(48.12) に類似だが $j=l\pm\frac{1}{2}$ の場合に適用可能な1電子状態に対する Landé の g 因子は

$$g=\frac{2l+1\pm1}{2l+1}$$

となることを証明せよ．(28.13) の Clebsch-Gordan 係数を $j_1=l$, $j_2=\frac{1}{2}$ の場合に拡張したものを利用すること．

〔解〕 $\epsilon(L_z+2S_z)=\epsilon(J_z+S_z)$, $\epsilon=\dfrac{e\mathsf{H}}{2mc}$ を jm の定まった状態ではさんだ期待値

$$\langle jm|\epsilon(L_z+2S_z)|jm\rangle=\langle jm|\epsilon(J_z+S_z)|jm\rangle$$
$$=\langle jm|\epsilon(m\hbar+S_z)|jm\rangle$$
$$=\epsilon m\hbar+\epsilon\langle jm|S_z|jm\rangle \qquad (1)$$

を求め，この結果を $\epsilon m\hbar g$ と書いたときの係数 g を求めればよい．

まず $|jm\rangle$ は L_z, S_z の固有状態ではないのでClebsch-Gordan係数を用いて L_z, S_z の固有状態で展開しておく．すなわち（28.1）は

$$|jm\rangle=|lm_l\tfrac{1}{2}m_s\rangle\langle lm_l\tfrac{1}{2}m_s|jml\tfrac{1}{2}\rangle \tag{2}$$

ただし $m_l+m_s=m$ かつ m_l, m_s について和をとる．

のように書くことができる．

ここでは $|lm_l\tfrac{1}{2}m_s\rangle$ は，たとえば

$$|lm_l, \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ \rangle\to(+)\psi_{lm_l}=v(\tfrac{1}{2})R(r)Y_{lm_l}(\theta,\phi)$$

$$|lm_l, \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle\to(-)\psi_{lm_l}=v(-\tfrac{1}{2})R(r)Y_{lm_l}(\theta,\phi)$$

のように対応する．ただし $v(\pm\tfrac{1}{2}), R(r)$ はそれぞれスピン波動関数，および動径方向の波動関数である．$l=1$ とすると（２）から得られる式は全体で（48.6）[39.6] に対応する．

$$\langle lm_l\tfrac{1}{2}m_s|jml\tfrac{1}{2}\rangle^*=\langle jml\tfrac{1}{2}|lm_l\tfrac{1}{2}m_s\rangle$$

と表わすことにすれば（２）を使って

$$\begin{aligned}&\langle jm|S_z|jm\rangle\\&\quad=\langle jml\tfrac{1}{2}|lm_l'\tfrac{1}{2}m_s'\rangle\langle lm_l'\tfrac{1}{2}m_s'|S_z|lm_l\tfrac{1}{2}m_s\rangle\langle lm_l\tfrac{1}{2}m_s|jml\tfrac{1}{2}\rangle\\&\quad=m_s\hbar\langle jml\tfrac{1}{2}|lm_l'\tfrac{1}{2}m_s'\rangle\langle lm_l'\tfrac{1}{2}m_s'|lm_l\tfrac{1}{2}m_s\rangle\langle lm_l\tfrac{1}{2}m_s|jml\tfrac{1}{2}\rangle\\&\quad=m_s\hbar\langle jml\tfrac{1}{2}|lm_l'\tfrac{1}{2}m_s'\rangle\delta_{m_lm_l'}\delta_{m_sm_s'}\langle lm_l\tfrac{1}{2}m_s|jml\tfrac{1}{2}\rangle\\&\quad=m_s\hbar\langle jml\tfrac{1}{2}|lm_l\tfrac{1}{2}m_s\rangle\langle lm_l\tfrac{1}{2}m_s|jml\tfrac{1}{2}\rangle\\&\quad=m_s\hbar|\langle lm_l\tfrac{1}{2}m_s|jml\tfrac{1}{2}\rangle|^2\end{aligned}$$

ただしこの式には $m_l+m_s=m$ の条件のもとで m_l, m_s についての和が含まれている．ところで m_s は $\pm\tfrac{1}{2}$ の２つの値しかとりえないので，結局上の式は２項からなり

$$\langle jm|S_z|jm\rangle=\frac{\hbar}{2}|\langle lm-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|jml\tfrac{1}{2}\rangle|^2-\frac{\hbar}{2}|\langle lm+\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|jml\tfrac{1}{2}\rangle|^2 \tag{3}$$

が得られる．この値を（１）に代入すれば

$$\begin{aligned}&\langle jm|\epsilon(L_z+2S_z)|jm\rangle\\&=\epsilon m\hbar+\frac{\epsilon\hbar}{2}|\langle lm-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|jml\tfrac{1}{2}\rangle|^2-\frac{\epsilon\hbar}{2}|\langle lm+\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|jml\tfrac{1}{2}\rangle|^2\end{aligned} \tag{4}$$

となる．あとは $j=l\pm\tfrac{1}{2}$ のそれぞれの場合に対する Clebsch-Gordan 係数 $\langle lm-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|jm\,l\tfrac{1}{2}\rangle$, $\langle lm+\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|jml\tfrac{1}{2}\rangle$ の値が求まればよいが，これは §28-4 の方法にしたがって計算すれば，結果は次のようになる[注]．

$$\langle lm-\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\ \ \tfrac{1}{2}\ |l+\tfrac{1}{2}ml\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$$

$$\langle lm+\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}|l+\tfrac{1}{2}ml\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \tag{5}$$

$$\langle lm-\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\ \ \tfrac{1}{2}\ |l-\tfrac{1}{2}ml\tfrac{1}{2}\rangle=-\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$$

$$\langle lm+\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}|l-\tfrac{1}{2}ml\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$$

これより $j=l+\frac{1}{2}$ のときは

$$\begin{aligned}&\langle l+\tfrac{1}{2},m|\epsilon(L_z+2S_z)|l+\tfrac{1}{2},m\rangle\\ &\quad=\epsilon m\hbar+\frac{\epsilon\hbar}{2}\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}-\frac{\epsilon\hbar}{2}\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}\\ &\quad=\epsilon m\hbar+\epsilon\hbar\frac{m}{2l+1}\\ &\quad=\epsilon m\hbar\frac{2l+2}{2l+1}\end{aligned}$$

$j=l-\frac{1}{2}$ のときは

$$\begin{aligned}&\langle l-\tfrac{1}{2},m|\epsilon(L_z+2S_z)|l-\tfrac{1}{2},m\rangle\\ &\quad=\epsilon m\hbar+\frac{\epsilon\hbar}{2}\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}-\frac{\epsilon\hbar}{2}\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}\\ &\quad=\epsilon mh-\epsilon\hbar\frac{m}{2l+1}\\ &\quad=\epsilon m\hbar\frac{2l}{2l+1}\end{aligned}$$

したがってこれより Landé の g 因子は

$$g=\frac{2l+1\pm1}{2l+1}\qquad j=l\pm\tfrac{1}{2} \tag{6}$$

となる．

〔注〕（5）式の導き方

j_1, j_2 が一般の場合に §28 の方法にしたがって Clebsch-Gordan 係数をすべて求めるのは無理だが，$j_2=\frac{1}{2}$ の場合には (28.3)，(28.4) から比較的楽に関係式が得られる．

まず (28.4) の変数のとり方を少し変えて

$$[j(j+1)-m(m+1)]^{\frac{1}{2}}\langle j_1m_1j_2m_2|jmj_1j_2\rangle$$

$$=[j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)]^{\frac{1}{2}}\langle j_1m_1+1j_2m_2|jm+1j_1j_2\rangle$$
$$+[j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)]^{\frac{1}{2}}\langle j_1m_1j_2m_2+1|jm+1j_1j_2\rangle \qquad (7)$$

ここで

$$j_1=l,\ \ j_2=\tfrac{1}{2},\ \ m=m_1+\tfrac{1}{2},\ \ m_2=\tfrac{1}{2},\ \ j=l+\tfrac{1}{2}$$

とおくと（7）より

$$[(l+\tfrac{1}{2})(l+\tfrac{3}{2})-(m_1+\tfrac{1}{2})(m_1+\tfrac{3}{2})]^{\frac{1}{2}}\langle lm_1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l+\tfrac{1}{2}m_1+\tfrac{1}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle$$
$$=[l(l+1)-m_1(m_1+1)]^{\frac{1}{2}}\langle lm_1+1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l+\tfrac{1}{2}m_1+\tfrac{3}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle$$

すなわち

$$\langle lm_1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l+\tfrac{1}{2}m_1+\tfrac{1}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{l+m_1+1}{l+m_1+2}}\langle lm_1+1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l+\tfrac{1}{2}m_1+\tfrac{3}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle \qquad (8)$$

(28.5) より

$$\langle ll\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l+\tfrac{1}{2}l+\tfrac{1}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle=1 \qquad (9)$$

ととる約束だから上の漸化式（8）より $m_1=l-1,\ l-2,\cdots,-l$ に対する一般式が得られる．（9）と合わせて $j=l+\frac{1}{2}$ のとき

$$\langle lm_1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l+\tfrac{1}{2}m_1+\tfrac{1}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{l+m_1+1}{2l+1}} \qquad (10)$$

となる．同様にして（7）で

$$j_1=l,\ \ j_2=\tfrac{1}{2},\ \ m=m_1+\tfrac{1}{2},\ \ m_2=\tfrac{1}{2},\ \ j=l-\tfrac{1}{2}$$

とおいて

$$\langle lm_1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l-\tfrac{1}{2},m_1+\tfrac{1}{2},l\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{l-m_1}{l-m_1-1}}\langle lm_1+1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l-\tfrac{1}{2}m_1+\tfrac{3}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle \qquad (11)$$

が得られ，これと直交性の条件より得られる (28.8) 式

$$\langle ll-1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l-\tfrac{1}{2}l-\tfrac{1}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle=-\sqrt{\frac{1}{2l+1}} \qquad (12)$$

より $m_1=l-1,\ l-2,\cdots,-l$ に対する式が得られ，これと (12) を合わせて

$$\langle lm_1\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|l-\tfrac{1}{2}m_1+\tfrac{1}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle=-\sqrt{\frac{l-m_1}{2l+1}} \qquad (13)$$

が得られる．(10), (13) において $m=m_1+\frac{1}{2}$ を使って書き換えれば（5）の中の2式が得られる．残りの2つは，$m_2=-\frac{1}{2}$ に対するものだが，これは (28.3) を少し書き換えて（7）に対応する式

$$[j(j+1)-m(m-1)]^{\frac{1}{2}}\langle j_1m_1j_2m_2|jmj_1j_2\rangle$$

$$=[j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)]^{\frac{1}{2}}\langle j_1m_1-1, j_2m_2|jm-1j_1j_2\rangle$$
$$+[j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)]^{\frac{1}{2}}\langle j_1m_1j_2m_2-1|jm-1j_1j_2\rangle \qquad (14)$$

において

$$j_1=l,\quad j_2=\tfrac{1}{2},\quad m=m_1-\tfrac{1}{2},\quad m_2=-\tfrac{1}{2},\quad j=l\pm\tfrac{1}{2}$$

とおいて得られる式，および (28.6) (28.8) からそれぞれ得られる式

$$\langle ll\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|l+\tfrac{1}{2}l-\tfrac{1}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{1}{2l+1}}$$

$$\langle ll\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|l-\tfrac{1}{2}l-\tfrac{1}{2}l\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}$$

を使えば解答中で使った残りの

$$\langle lm+\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|l\pm\tfrac{1}{2}, ml\tfrac{1}{2}\rangle$$

に対する表式が得られる．

問題XII-8 ［第2版，XI-問8と同一］

(48.11) [39.11] の二つの摂動項がアルカリ原子に対して等しくなる磁場の強さを算出せよ．

〔**解**〕 まず **L・S** 結合の項については (48.4) [39.4]，(48.5) [39.5] より

$$\langle\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\rangle=\frac{e^2\hbar^2Z^4}{2m^2c^2a_0{}^3n^3l(l+\frac{1}{2})(l+1)}\times\begin{cases}\frac{1}{2}l & (j=l+\frac{1}{2})\\ -\frac{1}{2}(l+1) & (j=l-\frac{1}{2})\end{cases}$$

また磁場の項に対しては，前問の結果を使って

$$\langle\epsilon(L_z+2S_z)\rangle=\frac{e\mathrm{H}}{2mc}\times m_z\hbar\times\begin{cases}\dfrac{2l+2}{2l+1} & (j=l+\frac{1}{2})\\[2mm] \dfrac{2l}{2l+1} & (j=l-\frac{1}{2})\end{cases}$$

これより

$$\frac{\langle\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\rangle}{\langle\epsilon(L_z+2S_z)\rangle}=\frac{1}{\mathrm{H}}\,\frac{\frac{e\hbar}{2mc}}{a_0{}^3}\,\frac{Z^4}{n^3m_z}\times\begin{cases}\dfrac{1}{(l+1)^2} & (j=l+\frac{1}{2})\\[2mm] -\dfrac{1}{l^2} & (j=l-\frac{1}{2})\end{cases}$$

ここで (48.5) [39.5] 以下の記述より，得られた値そのものを正確に計算することにはあまり意味がないことを考えてこの比がほぼ1のオーダーになるのは，最初の係数だ

けで評価して

$$\mathrm{H}\sim\frac{\left(\dfrac{e\hbar}{2mc}\right)}{a_J^3}=\frac{0.927\times10^{-20}}{(5.29\times10^{-9})^3}\approx0.63\times10^5\ \mathrm{gauss}$$

となる.

問題XII-9　［第2版，XI-問9と同一］

磁場が弱い場合，アルカリ原子での $^2P\to{}^2S$ 遷移の π および σ Zeeman 成分の相対的なずれおよび強度を示すダイアグラムをつくれ．磁場が強い場合にも同様なダイアグラムをつくれ.

〔**解**〕(48.11)［39.11］で与えられるハミルトニアン

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2+V(r)+\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}+\epsilon(L_z+2S_z),\qquad \epsilon=\frac{e\mathrm{H}}{2m_ec}\tag{1}$$

において磁場が弱い場合（Zeeman 効果）は，第三項までを無摂動のハミルトニアン，第四項を摂動ハミルトニアンとして扱う．無摂動ハミルトニアンは問題5の結果より $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ と可換なので，状態を記述する量子数として $LSJM$ をとることができる．摂動のないとき異なるMの値に対応する状態は縮退を起こしているが，摂動を加えると各エネルギー準位にずれを生じ，^2P および ^2S の各準位間の相対的なずれは，スペクトル線にあらわれる振動数のずれとなってあらわれる．問題はこのスペクトル線の変位および各遷移の強度を求めることである．一方磁場の強い場合には $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ 相互作用の項を無視し，最初の2項を無摂動のハミルトニアンにとり，第4項を摂動にとる．この場合無摂動状態を表わす量子数として $LSJM$, LSM_LM_S いずれをとることもできるが，後者は摂動を加えた場合でもよい量子数となっている.

（磁場の弱い場合）

この場合摂動 $\epsilon(L_z+2S_z)$ を加えたことによる各エネルギー準位のずれは §48-4［§39.4］に述べられているように

$$\Delta E=\langle\epsilon(L_z+2S_z)\rangle=\epsilon m\hbar g\qquad \epsilon=\frac{eH}{2m_ec}$$

の形で与えられ，Landé の g 係数の値は問題7または (48.12) に与えられているので

$$\Delta E=\langle\epsilon(L_z+2S_z)\rangle=\begin{cases}\frac{4}{3}\epsilon m\hbar\cdots{}^2P_{\frac{3}{2}}\\ \frac{2}{3}\epsilon m\hbar\cdots{}^2P_{\frac{1}{2}}\\ 2\epsilon m\hbar\cdots{}^2S_{\frac{1}{2}}\end{cases} \tag{2}$$

となる．これより各エネルギー準位のずれは，mの値を次々に代入すれば得られ結果はおよそ図24に示すとおりである．これから得られる各準位間のエネルギー間隔の相対的な変化は（4）の表のスペクトル線のずれで表わされている．ここでは $e>0$ したがって $\epsilon>0$ なので，この数値はそのままずれの方向をも与え，したがってスペクトル線の振動数のずれをもあらわしている．

次に各スペクトル線の強度は自然放出の遷移確率（45.22）[36.22] によって与えられ

$$\frac{4e^2k^2\omega_{kn}}{3\hbar c}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2=\frac{4e^2\omega_{kn}{}^3}{3\hbar c^3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \tag{3}$$

である．本書では光を放出する場合にはkを最初の状態に，nを最終状態にとっているので，状態kとして ${}^2P_{\frac{3}{2}}$，または ${}^2P_{\frac{1}{2}}$ に属す各状態を，状態nとして ${}^2S_{\frac{1}{2}}$ に属す状態を代入して計算してやればよい．各状態で $\mathbf{J}^2, J_z$ の固有関数は動径部分の波動関数を除いて（48.6）[39.6] で与えられるので，これより（3）にあらわれる行列要素が計算できる．（3）の行列要素の計算には

$$\begin{aligned}&\int u_{21m}{}^*(\mathbf{r})\begin{Bmatrix}x\\y\\z\end{Bmatrix}u_{100}(\mathbf{r})d^3r\\
&\quad=\int R_{21}(r)Y_{1m}{}^*(\theta,\phi)\begin{Bmatrix}x\\y\\z\end{Bmatrix}R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\phi)d^3r\\
&\quad=\left[\int_0^\infty R_{21}(r)rR_{10}(r)r^2dr\right]\\
&\qquad\times\left[\int_0^\pi\int_0^{2\pi}Y_{1m}{}^*(\theta,\phi)\begin{Bmatrix}\sin\theta\cos\phi\\ \sin\theta\sin\phi\\ \cos\theta\end{Bmatrix}Y_{00}(\theta,\phi)\sin\theta\, d\theta\, d\phi\right]\end{aligned}$$

の形の積分があらわれるが，この計算はすでに問題XI-8で行なわれている．また（3）における ω_{kn} をほぼ一定とみなせば行列要素の動径方向の積分が共通なので，相対強度すなわち遷移確率の比は角部分の積分のみで決定される．したがって遷移確率（3）のうち共通の比例定数を除いた角部分の積分から得られる値を，本文にならって $|x|^2$,

$|y|^2, |z|^2$ と書くことにすると，これらはそれぞれ x, y, z 方向に偏った光のスペクトルの強度を与えることになる．§46-2［§37.2］および §48-4［§39.4］または問題XI-8の結果からわかるように，$|z|^2$ は $\Delta l=\pm1$，$\Delta m=0$ のときのみ零でない．この光は z 軸（すなわち磁場の方向）に垂直な方向にのみ放射される［π 成分］．また $|x|^2, |y|^2$ は $\Delta l=\pm1$，$\Delta m=\pm1$ のときのみ零でない値をもち，この光は xy 平面で観測すれば直線偏光であり，z 軸方向から観測すれば円偏光として観測される［σ 成分］．円偏光の強度は $\left|\dfrac{x\pm iy}{\sqrt{2}}\right|^2$ で与えられるが，その大きさは $|x|^2$ または $|y|^2$ に等しくなる[注]．

ここでは例として ${}^2P_{\frac{3}{2}}(m=-\frac{1}{2})\to{}^2S_{\frac{1}{2}}(m=\frac{1}{2})$ の遷移における $|x|^2$ の計算を示しておこう．

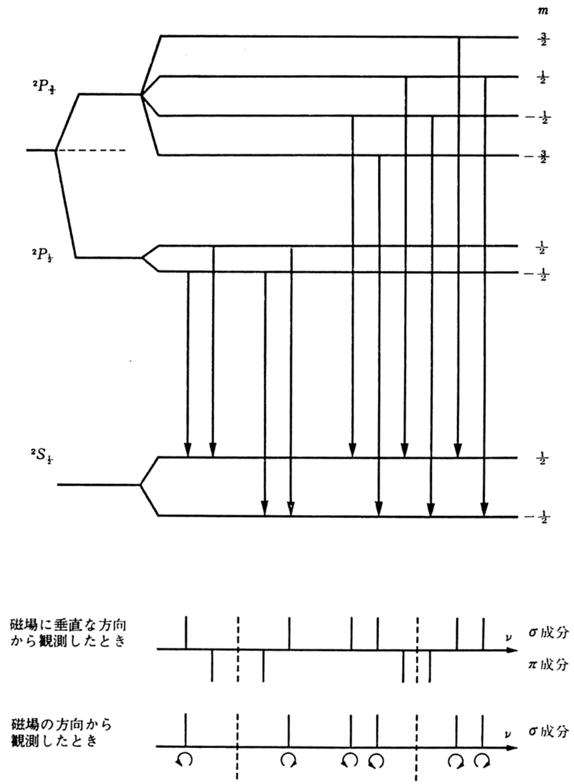
$$\left|\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sqrt{\frac{1}{3}}[\sqrt{2}(-)Y_{10}+(+)Y_{1-1}]^*\sin\theta\cos\phi[(+)Y_{00}]\sin\theta\,d\theta\,d\phi\right|^2$$

$$=\left|\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1-1}{}^*\sin\theta\cos\phi Y_{00}\sin\theta\,d\theta\,d\phi\right|^2$$

$$=\left|\sqrt{\frac{1}{3}}\sqrt{\frac{1}{6}}\right|^2=\frac{1}{18}$$

他も同様にして計算される．このようにして得られる，各エネルギー準位間の相対的なず

	m_P	m_S	スペクトル線のずれ（エネルギー準位の相対的なずれ）	π 成分	σ 成分			
				$\lvert z\rvert^2$	$\lvert x\rvert^2=\lvert y\rvert^2$	$\left\lvert\frac{x+iy}{\sqrt{2}}\right\rvert^2$	$\left\lvert\frac{x-iy}{\sqrt{2}}\right\rvert^2$	
${}^2P_{\frac{3}{2}}\to{}^2S_{\frac{1}{2}}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$3\times(\epsilon\hbar/3)$	0	3/18	3/18	0	
	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	9	0	0	0	0	（禁止）
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	-1	4/18	0	0	0	
	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	5	0	1/18	1/18	0	
	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	-5	0	1/18	0	1/18	
	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	4/18	0	0	0	（4）
	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	-9	0	0	0	0	（禁止）
	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-3	0	3/18	0	3/18	
${}^2P_{\frac{1}{2}}\to{}^2S_{\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	-2	2/18	0	0	0	
	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	4	0	2/18	2/18	0	
	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	-4	0	2/18	0	2/18	
	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	2/18	0	0	0	



磁場の弱い場合

図 24

れ（スペクトル線のずれ）および各光の成分の強度は前頁の表の通りであり，この結果は（48.7）[39.7] と一致している．なお光の各成分の強度がすべて零であるのは禁止遷移をあらわす．

またこのときあらわれるスペクトル線の様子を図24に示しておいた．横軸は光の振動数をあらわす．磁場のないとき **L**・**S** 相互作用のため ^2P 状態が分かれているので，もとのスペクトル線は2本観測される．その位置が点線で示されている．また磁場の方

向から観測したときにはπ成分はあらわれず，円偏光のσ成分のみである．偏光の区別を図に示しておいた．時計回りの矢印はz軸の正の方向に放射されるのが右旋光の光であることを示している．

（磁場の強いとき）

この場合には LSM_LM_S を無摂動系を記述する量子数として採用すると，摂動エネルギー $\epsilon\hbar(L_z+2S_z)$ も対角化され $\epsilon\hbar(m_l+2m_s)$ で与えられることになる．したがって各準位のずれが（48.14）[39.14] によって与えられる．

$$\Delta E=\langle\epsilon\hbar(L_z+2S_z)\rangle=\left\{\begin{array}{cccl} & m_l & m_s & \\ 2\epsilon\hbar & 1 & \frac{1}{2} & \\ \epsilon\hbar & 0 & \frac{1}{2} & \\ 0 & -1 & \frac{1}{2} & \\ 0 & 1 & -\frac{1}{2} & {}^2P \\ -\epsilon\hbar & 0 & -\frac{1}{2} & \\ -2\epsilon\hbar & -1 & -\frac{1}{2} & \\ \epsilon\hbar & 0 & \frac{1}{2} & \\ -\epsilon\hbar & 0 & -\frac{1}{2} & {}^2S \end{array}\right. \qquad (5)$$

	$m_lm_s\to m_l'm_s'$	スペクトル線のずれ（エネルギー準位の相対的なずれ）	π成分 $\lvert z\rvert^2$	σ 成分 $\lvert x\rvert^2=\lvert y\rvert^2$	$\left\lvert\frac{x+iy}{\sqrt{2}}\right\rvert^2$	$\left\lvert\frac{x-iy}{\sqrt{2}}\right\rvert^2$	(6)
${}^2P\to{}^2S$	$1\ \frac{1}{2}\quad 0\ \frac{1}{2}$	$1\times(\epsilon\hbar)$	0	1/6	1/6	0	
	$1\ \frac{1}{2}\quad 0\ -\frac{1}{2}$	3	0	0	0	0	(禁止)
	$0\ \frac{1}{2}\quad 0\ \frac{1}{2}$	0	2/6	0	0	0	
	$0\ \frac{1}{2}\quad 0\ -\frac{1}{2}$	2	0	0	0	0	(禁止)
	$-1\ \frac{1}{2}\quad 0\ \frac{1}{2}$	-1	0	1/6	0	1/6	
	$-1\ \frac{1}{2}\quad 0\ -\frac{1}{2}$	1	0	0	0	0	(禁止)
	$1\ -\frac{1}{2}\quad 0\ \frac{1}{2}$	-1	0	0	0	0	(禁止)
	$1\ -\frac{1}{2}\quad 0\ -\frac{1}{2}$	1	0	1/6	1/6	0	
	$0\ -\frac{1}{2}\quad 0\ \frac{1}{2}$	-2	0	0	0	0	(禁止)
	$0\ -\frac{1}{2}\quad 0\ -\frac{1}{2}$	0	2/6	0	0	0	
	$-1\ -\frac{1}{2}\quad 0\ \frac{1}{2}$	-3	0	0	0	0	(禁止)
	$-1\ -\frac{1}{2}\quad 0\ -\frac{1}{2}$	-1	0	1/6	0	1/6	

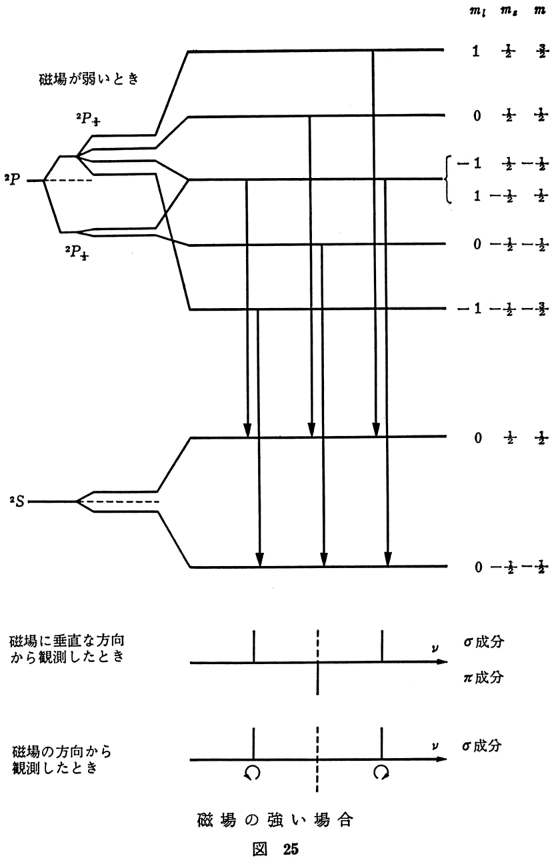


図 25

これから導かれるエネルギー間隔のずれは（6）に与えてある．

次に各スペクトル線の強度はやはり（3）から計算できる．ここでの最初の状態および最終状態は（48.14）[39.14] であるが，この計算は磁場の弱い場合と同様に計算されて，その結果は前頁の表の通りである．ここでもすべての強度が0であるのは禁止遷

移であることを示す．

また磁場の弱いときと同様に各エネルギー準位の相対的な変化およびスペクトル線のずれの様子を図25に示しておいた．図の書き方は前図と同様であるが磁場が弱い場合からの移行の様子もつけておいた．

〔注〕 σ 成分を z 軸（磁場の方向）に沿ってみれば円偏光として観測される．円偏光に対する遷移行列の計算は §44 [§35] の計算を円偏光に適用すれば得られる．z 軸方向に進行する光で，光の振動面が，z＝一定の面で進行方向に向ってみたとき時計回りに回転する光（右旋光）に対するベクトルポテンシャルは，本文と同様 $|A_0|$ を実数として，

$$\begin{aligned} A_x(z,t) &= 2|A_0|\cos(kz-\omega t+\alpha) \\ A_y(z,t) &= -2|A_0|\sin(kz-\omega t+\alpha) \\ A_z(z,t) &= 0 \end{aligned} \tag{7}$$

で与えられる．ただしこの円偏光に伴う光の強度は，$|A_0|$ の大きさを本文と同じにとれば，(44.12) [35.12] の2倍になっている．また (44.11) [35.11] と同様複素数を使ってポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ をあらわし（7）を

$$\begin{aligned} A_x(z,t) &= A_{0x}e^{i(kz-\omega t)}+A_{0x}{}^*e^{-i(kz-\omega t)} \\ A_y(z,t) &= A_{0y}e^{i(kz-\omega t)}+A_{0y}{}^*e^{-i(kz-\omega t)} \\ A_z(z,t) &= 0 \end{aligned} \tag{8}$$

と書けば $\mathbf{A}_0$ の成分の間には

$$A_{0y}=iA_{0x}, \qquad \text{ただし} \quad A_{0x}=|A_0|e^{i\alpha}\equiv A_0$$

なる関係が成立する．すると

$$H'=\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla, \qquad \mathbf{A}_0\cdot\nabla=A_0\left(\frac{\partial}{\partial x}+i\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

だから (44.14) [35.14] は

$$\begin{aligned} \langle k|H'^0|n\rangle &= \frac{ie\hbar}{mc}\int u_k{}^*e^{ikz}\mathbf{A}_0\cdot\nabla u_n\,d^3r \\ &= \frac{ie\hbar}{mc}\int u_k{}^*e^{ikz}A_0\left(\frac{\partial}{\partial x}+i\frac{\partial}{\partial y}\right)u_n d^3r \end{aligned}$$

となり，以後本文と同様にして遷移確率が計算できる．ただし光の強度を考えて (44.15) [35.15] を

$$|\mathbf{A}_0|^2=\frac{1}{2}\frac{2\pi c}{\omega^2}I(\omega)\Delta\omega$$

で置き換えてやればよい．電気双極子近似のもとでの遷移確率は（44.17）[35.17]，(44.20) [35.20] より（44.21）[35.21] に対応する式は，

$$\frac{4\pi^2e^2}{m^2c\omega_{kn}^2}\frac{1}{2}I(\omega_{kn})\left|\int u_k^*\left(\frac{\partial}{\partial x}+i\frac{\partial}{\partial y}\right)u_n d^3r\right|^2$$

$$=\frac{4\pi^2e^2}{m^2c\omega_{kn}^2}\frac{1}{2}I(\omega_{kn})\left|-\frac{m}{\hbar}\omega_{kn}\int u_k^*(x+iy)u_n d^3r\right|^2$$

$$=\frac{4\pi^2e^2}{\hbar^2c}I(\omega_{kn})\left|\int u_k^*\frac{x+iy}{\sqrt{2}}u_n d^3r\right|^2$$

$$=\frac{4\pi^2e^2}{\hbar^2c}I(\omega_{kn})\left|\left\langle k\left|\frac{x+iy}{\sqrt{2}}\right|n\right\rangle\right|^2$$

同様にして左旋光に対しては $\frac{x+iy}{\sqrt{2}}$ を $\frac{x-iy}{\sqrt{2}}$ で置き換えればよいことがわかる．

さて $\frac{x\pm iy}{\sqrt{2}}$ の行列要素は，本文 §46-1 [§37.1] または問題XII-13の計算より $\Delta l=\pm1$，$\Delta m=\pm1$ のときのみ零でない．したがって本文の表記によれば $\frac{x+iy}{\sqrt{2}}$ は z 軸正の方向へ進行する右旋光の放出および吸収を記述し $\frac{x-iy}{\sqrt{2}}$ は同じく左旋光に対する過程を記述する．

問題XII-10　［第2版，XI-問10と同一］

電子運動の一周期の間に，分子の原子核が通過する距離の，分子の大きさに対する比は，振動運動の場合には約 $(m/M)^{\frac{3}{4}}$ のオーダーで，回転運動の場合には (m/M) のオーダーであることを示せ．これらの結果は，断熱型の近似の正しさを示しているか？

〔**解**〕 原子核の振動および回転に伴う速さを V_v, V_r 電子の運動の周期を T とすれば，評価すべき量は V_vT/a および V_rT/a である．

原子または分子の大きさを a のオーダーとして，電子については $pa\sim\hbar$ より $v_e\sim\frac{\hbar}{ma}$ である．これより電子が a のオーダーの範囲を動くに要する時間は

$$T\sim\frac{a}{v_e}\sim\frac{ma^2}{\hbar}$$

となる．これは§3-1 [〃] で得られた関係とも矛盾しない．すなわち $E_eT\sim\frac{\hbar^2}{ma^2}T\sim\hbar$

が成立する．

原子核の存在している領域を大きさAの程度，振動に伴なうエネルギーを E_v とすれば

$$\tfrac{1}{2}K_0A^2\sim E_v$$

より

$$A\sim\sqrt{\frac{E_v}{K_0}}\sim\sqrt{E_v\frac{a^2}{E_e}}\sim a\left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{1}{4}}$$

ただし最後の移行に際して (49.2) [40.2] を使い，その前の変形には本文にあるように $K_0\sim E_e/a^2$ を使った．これより不確定性原理を適用して

$$(MV_v)\cdot A\sim\hbar$$

ゆえに

$$V_v\sim\frac{\hbar}{MA}\sim\frac{\hbar}{M}\frac{1}{a}\left(\frac{M}{m}\right)^{\frac{1}{4}}$$

または

$$V_vT\sim\frac{\hbar}{M}\frac{1}{a}\left(\frac{M}{m}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{ma^2}{\hbar}=\left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{3}{4}}a \tag{1}$$

が得られる．

次に回転運動に対しては，角運動量が $\hbar$ の程度の大きさであること，および $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ より

$$aMV_r\sim\hbar$$

したがって

$$V_r\sim\frac{\hbar}{aM}$$

これより

$$V_rT\sim\frac{\hbar}{aM}\frac{ma^2}{\hbar}=\frac{m}{M}\cdot a \tag{2}$$

となる．(1)，(2) より振動運動，および回転運動に伴って時間Tの程度の間に原子核の動く距離の a に対する比はそれぞれ

$$\frac{V_vT}{a}\sim\left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{3}{4}},\qquad \frac{V_rT}{a}\sim\frac{m}{M}$$

の大きさである．§49-1 [§40.1] にあるように $m/M\sim10^{-3}$ ないし 10^{-4} の大きさで小さいので，電子の運動を考える際には原子核の運動に伴って起こる電子に対するハミ

ルトニアンの変化はゆるやかで，その影響を断熱近似でとり扱うことができると予想される．

問題XII-11　［第2版，XI-問11と同一］

水素分子に対して得られた核間ポテンシャル（49.14）[40.14]は大きなRに対して§32で得られた$-1/R^6$の形に近づいてゆくか？　もしそうでないとすれば，その理由は？

〔解〕　まず（49.10）[40.10]，（49.11）[40.11]を考慮して

$$H_{1A}\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1{}^2-\frac{e^2}{r_{1A}}$$
$$H_{2B}\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2{}^2-\frac{e^2}{r_{2B}}\qquad(1)$$

とおく．

$$\left.\begin{aligned}H_{1A}u_A(\mathbf{r}_1)=E_0u_A(\mathbf{r}_1)\\H_{2B}u_B(\mathbf{r}_2)=E_0u_B(\mathbf{r}_2)\end{aligned}\right\},\qquad E_0=-\frac{e^2}{2a_0}\qquad(2)$$

である．評価すべき式は（49.14）[40.14]の右辺

$$\frac{H_{11}+H_{12}}{1+\gamma}$$

であり，かつ（49.13）[40.13]より

$$\left.\begin{aligned}&H_{11}=H_{22}\equiv\iint u_1Hu_1\,d^3r_1\,d^3r_2\\&H_{12}=H_{21}\equiv\iint u_1Hu_2\,d^3r_1\,d^3r_2\\&\gamma\equiv\iint u_1u_2\,d^3r_1\,d^3r_2\\&u_1=u_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)\\&u_2=u_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=u_A(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_1)\\&H=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1{}^2+\nabla_2{}^2)+e^2\left(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{1A}}-\frac{1}{r_{2B}}-\frac{1}{r_{1B}}-\frac{1}{r_{2A}}\right)\end{aligned}\right\}\qquad(3)$$

である．これより，まず

$$H_{11}=\iint u_1{}^*(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)Hu_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)d^3r_1\,d^3r_2$$

$$=\iint u_A^*(\mathbf{r}_1)u_B^*(\mathbf{r}_2)\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1{}^2+\nabla_2{}^2)$$

$$+e^2\Big(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{1A}}-\frac{1}{r_{2B}}-\frac{1}{r_{1B}}-\frac{1}{r_{2A}}\Big)\Big]u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

$$=\iint u_A^*(\mathbf{r}_1)u_B^*(\mathbf{r}_2)\Big[\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1{}^2-\frac{e^2}{r_{1A}}\Big)+\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2{}^2-\frac{e^2}{r_{2B}}\Big)\Big]$$

$$\times u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

$$+\iint u_A^*(\mathbf{r}_1)u_B^*(\mathbf{r}_2)\Big[e^2\Big(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{1B}}-\frac{1}{r_{2A}}\Big)\Big]$$

$$\times u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 \qquad (4)$$

この式の最初の積分は $u_A(\mathbf{r}_1)$, $u_B(\mathbf{r}_2)$ がそれぞれ規格化されていること，および（1），（2）式より

$$E_0+E_0=2E_0$$

を与える．2番目の積分において［　］内は，$\mathbf{r}_{1A}\to\mathbf{r}_1$，$\mathbf{r}_{2B}\to\mathbf{r}_2$ のおきかえをすると（32.11）[27.11] における H' と全く同じになる．そこで（32.12）[27.11] および問題VIII-7と同じようにして $1/R$ について展開すると

$$e^2\Big(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{1B}}-\frac{1}{r_{2A}}\Big)=\frac{e^2}{R^3}(x_{1A}x_{2B}+y_{1A}y_{2B}-2z_{1A}z_{2B})$$

$$+\frac{e^2}{R^4}\frac{3}{2}[r_{1A}{}^2z_{2B}-r_{2B}{}^2z_{1A}$$

$$+(2x_{1A}x_{2B}+2y_{1A}y_{2B}-3z_{1A}z_{2B})(z_{1A}-z_{2B})]+\cdots \qquad (5)$$

が得られるが，この式の各項が，x, y, z のいずれかについて奇関数であること，および $|u_A(\mathbf{r}_1)|^2$, $|u_B(\mathbf{r}_2)|^2$ が球対称であることから（4）の2番目の積分は零である．したがって

$$H_{11}=2E_0$$

次に

$$H_{12}=\iint u_1^*(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)Hu_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

$$=\iint u_2^*(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)Hu_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$

$$=\iint u_A^*(\mathbf{r}_2)u_B^*(\mathbf{r}_1)\Big[\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1{}^2-\frac{e^2}{r_{1A}}\Big)+\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}-\frac{e^2}{r_{2B}}\Big)\Big]$$

$$\times u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_1 d^3r_2$$

$$+\iint u_A^*(\mathbf{r}_2)u_B^*(\mathbf{r}_1)\left[e^2\left(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{1B}}-\frac{1}{r_{2A}}\right)\right]$$

$$\times u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_1 d^3r_2 \qquad (6)$$

この式の最初の積分は（1），（2），（3）より

$$2E_0\iint u_A^*(\mathbf{r}_2)u_B^*(\mathbf{r}_1)u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_1 d^3r_2$$

$$=2E_0\int u_2^*(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)u_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)d^3r_1 d^3r_2$$

$$=2E_0\gamma^*=2E_0\gamma$$

であり，また（6）の2番目の積分において［　］内はやはり（5）で与えられるが，今度の場合は被積分関数の中に現われる．

$$u_B^*(\mathbf{r}_1)u_A(\mathbf{r}_1),\qquad u_A^*(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_2)$$

は $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ に関して球対称ではないので，積分は零にはならない．したがってこの項は H_{12} に対して $1/R^3$ に比例する項を与える[注]．すなわち

$$H_{12}=2E_0\gamma+C\frac{e^2}{R^3}+\cdots \qquad (C\text{は定数})$$

以上の結果から，$1/R^3$ までの近似のもとで

$$\frac{H_{11}+H_{12}}{1+\gamma}=\frac{2E_0+2E_0\gamma+C\dfrac{e^2}{R^3}}{1+\gamma}=2E_0+\frac{C}{1+\gamma}\frac{e^2}{R^3} \qquad (7)$$

となる．ここで $2E_0$ は摂動のないときのエネルギーで，残りの項は van-der Waals の相互作用の場合には $1/R^3$ の項が零となって $1/R^6$ から始まったのとは異なり $1/R^3$ の項からの寄与が存在する．上の計算からわかるように，この H_{12} から現われる $1/R^3$ の項は，電子が両方の原子の回りをまわることからくる効果なので，van-der Waals の場合には現われえなかった項のはずである．(49.14)［40.14］以下の説明にあるように，この項の存在は，それぞれの電子と原子核との間のクーロン相互作用によりエネルギー準位を引下げる効果をあらわしているので（7）の最後の項は負のはずである．

〔注〕（6）の H_{12} の計算に現われた積分はいずれも問題X-20で使われた回転楕円体座標を導入することにより計算が遂行できる．まず

$$\gamma=\int u_1 u_2\, d^3r_1\, d^3r_2$$

$$=\int u_A{}^*(\mathbf{r}_1)u_B{}^*(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_1)u_A(\mathbf{r}_2)d^3r_1\, d^3r_2$$

$$=\left[\int u_A{}^*(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_1)d^3r_1\right]\cdot\left[\int u_B{}^*(\mathbf{r}_2)u_A(\mathbf{r}_2)d^3r_2\right]$$

ここで原子 A, B から電子1までの距離を r_1, r_2 とし，また波動関数はいずれも水素原子の基底状態に対するものであることを使うと

$$\int u_A{}^*(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_1)d^3r_1=\int u_{100}(r_1)u_{100}(r_2)d^3r$$

となり，電子2についての積分も同じ結果を与えるので結局

$$\gamma=\left[\int u_{100}(r_1)u_{100}(r_2)d^3r\right]^2$$

が得られる．ここで原子核 A, B の位置を焦点，AB の中点を原点とする回転楕円体座標を導入すると，

$$\xi=\frac{r_1+r_2}{R},\qquad \eta=\frac{r_1-r_2}{R},$$

$$d^3r=\left(\frac{R}{2}\right)^3(\xi^2-\eta^2)d\xi\, d\eta\, d\varphi$$

だから

$$\int u_{100}(r_1)u_{100}(r_2)d^3r=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\int e^{-\frac{r_1+r_2}{a_0}}d^3r$$

$$=\frac{1}{\pi a_0{}^3}\left(\frac{R}{2}\right)^3\int_1^\infty\int_{-1}^1\int_0^{2\pi}e^{-\frac{R}{a_0}\xi}(\xi^2-\eta^2)d\xi\, d\eta\, d\varphi$$

$$=\left[1+\frac{R}{a_0}+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right]e^{-\frac{R}{a_0}}$$

したがって

$$\gamma=\left[1+\frac{R}{a_0}+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right]^2 e^{-\frac{2R}{a_0}} \tag{8}$$

である．

次に（6）の2番目の積分で［　］内を $1/R^3$ までとると

$$\iint u_A{}^*(\mathbf{r}_2)u_B{}^*(\mathbf{r}_1)\frac{e^2}{R^3}[x_{1A}x_{2B}+y_{1A}y_{2B}-2z_{1A}z_{2B}]u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_1\, d^3r_2$$

A, B 2原子核を結ぶ直線方向に z 軸をとると

$$u_B{}^*(\mathbf{r}_1)u_A(\mathbf{r}_1), \qquad u_A{}^*(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_2)$$

は z 軸まわりの回転に対して対称．したがって $x_{1A}x_{2B}+y_{1A}y_{2B}$ を含む項の積分は零．残る項は

$$-2\frac{e^2}{R^3}\int u_A{}^*(\mathbf{r}_2)u_B{}^*(\mathbf{r}_1)z_{1A}z_{2B}u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_1\,d^3r_2$$

$$=-2\frac{e^2}{R^3}\left[\int u_B{}^*(\mathbf{r}_1)z_{1A}u_A(\mathbf{r}_1)d^3r_1\right]\cdot\left[\int u_A{}^*(\mathbf{r}_2)z_{2B}u_B(\mathbf{r}_2)d^3r_2\right] \tag{9}$$

γ の計算に使ったと同じ変数および座標を導入すると原点は AB の中点だから

$$z_{1A}=\frac{R}{2}+z=\frac{R}{2}+\frac{R}{2}\xi\eta=\frac{R}{2}(1+\xi\eta)$$

これより電子1についての積分は

$$\int u_B{}^*(\mathbf{r}_1)z_{1A}u_A(\mathbf{r}_1)d^3r_1=\int u_{100}(r_2)\left(\frac{R}{2}+z\right)u_{100}(r_1)d^3r$$

$$=\frac{R}{2}\int u_{100}(r_2)\,u_{100}(r_1)\,d^3r$$

$$=\frac{a_0}{2}\left(\frac{R}{a_0}+\left(\frac{R}{a_0}\right)^2+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^3\right)e^{-\frac{R}{a_0}}$$

となる，電子2も同じ結果を与えるので（9）は結局

$$-2\frac{e^2}{R^3}\left[\frac{a_0}{2}\left(\frac{R}{a_0}+\left(\frac{R}{a_0}\right)^2+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^3\right)\right]^2e^{-\frac{2R}{a_0}} \tag{10}$$

となり負の値をとるので（7）のエネルギー準位を $2E_0$ より下げる寄与をする．ただし（7）に現われる C は実は R に依存する量であることもこの式よりわかる．

問題XII-12　［第2版，XI-問12と同一］

剛体回転子に対する波動方程式をつくり，それを解け．；ただし，この剛体回転子はある特定の軸のまわりの回転の運動エネルギーをもたず，かつ二つの直交する軸のまわりの慣性能率は等しいものとする．

〔解〕　剛体の主慣性軸を ξ, η, ζ それらの軸のまわりの慣性モーメント，および角運動量をそれぞれ A, B, C および I_ξ, I_η, I_ζ とすれば，ハミルトニアンは

$$H=\frac{I_\xi{}^2}{2A}+\frac{I_\eta{}^2}{2B}+\frac{I_\zeta{}^2}{2C} \tag{1}$$

で与えられる．このハミルトニアンに対応する波動方程式を作るために，I_ξ, I_η, I_ζ に対応する微分演算子を求めねばならない．

まず剛体の運動の状態を記述するための変数として Euler の角 ϕ, θ, ψ を導入する*)．これは次のように定義される．まず各主軸 ξ, η, ζ がそれぞれ x, y, z 軸と一致していた状態から出発し，剛体を

i）z 軸のまわりに ϕ だけ回転する．この結果 ζ 軸は動かず ξ, η 軸は x, y 平面内で回転し方向を変える．

ii）次に新たな方向に移動している ξ 軸のまわりに θ だけ回転する．この軸を節線とよぶ．この結果 ζ 軸も z 軸から離れる．

iii）次に新しく移動した ζ 軸のまわりに ψ だけ回転する．これにより ξ 軸も節線から

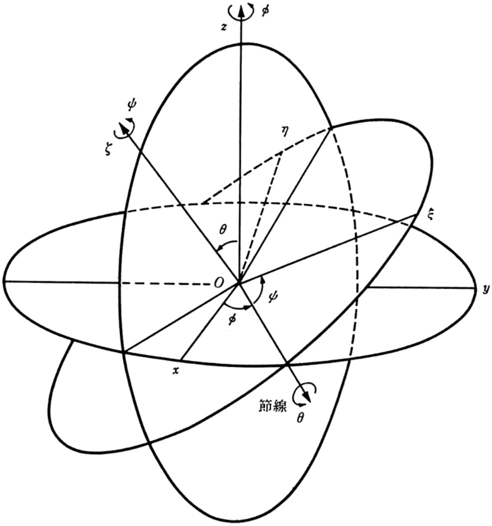


図　26

*) Euler の角の定義には種々異なったとり方があるが，ここでは本物理学叢書第11巻ゴールドスタイン「古典力学」の定義にならった．

離れる.

この ϕ, θ, ψ によって剛体の状態は完全に記述される. それらの変数はそれぞれ z 軸, 節線, および ζ 軸のまわりの回転を記述している. そこでこれらの軸のまわりの無限小回転の生成演算子をそれぞれ, I_ϕ, I_θ, I_ψ で表わすことにすれば, たとえば z 軸まわりの角 ω の無限小回転を与える変換 $U_{R\phi}(\omega)$ に対して

$$U_{R\phi}(\omega) \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\omega I_\phi$$

および

$$U_{R\phi}(\omega)\psi(\phi, \theta, \psi) = \psi(R_\phi^{-1}(\phi, \theta, \psi)) = \psi(\phi - \omega, \theta, \psi)$$
$$\approx \psi(\phi, \theta, \psi) - \omega \frac{\partial}{\partial \phi}\psi(\phi, \theta, \psi)$$

が成り立ち, これより $I_\phi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi}$ が得られる. 同様の手続より得られる結果をまとめると,

$$I_\phi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi}, \qquad I_\theta = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \theta}, \qquad I_\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \psi} \tag{2}$$

である. 次にこれらの演算子と ξ, η, ζ 軸まわりの回転の生成演算子 I_ξ, I_η, I_ζ との関係を求めてみよう. そのために空間内のある単位ベクトル $\boldsymbol{\lambda}$ を軸とする角 ω の無限小回転の変換は (27.6) で $\boldsymbol{\phi} \to \omega\boldsymbol{\lambda}$ として

$$U_{R\lambda}(\omega) \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\omega\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{L}$$

と表わされることに着目する. これより $\boldsymbol{\lambda}$ を軸とする回転の生成演算子は $\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{L}$ である. z 軸, 節線および ζ 軸方向の単位ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{\lambda}_\phi, \boldsymbol{\lambda}_\theta, \boldsymbol{\lambda}_\psi$ とすると

$$\boldsymbol{\lambda}_\phi = (0, 0, 1)$$
$$\boldsymbol{\lambda}_\theta = (\cos\phi, \sin\phi, 0)$$
$$\boldsymbol{\lambda}_\psi = (\sin\theta\sin\phi, -\sin\theta\cos\phi, \cos\theta)$$

であるから

$$I_\phi = \boldsymbol{\lambda}_\phi\cdot\mathbf{L} = L_z$$
$$I_\theta = \boldsymbol{\lambda}_\theta\cdot\mathbf{L} = \cos\phi L_x + \sin\phi L_y \tag{3}$$
$$I_\psi = \boldsymbol{\lambda}_\psi\cdot\mathbf{L} = \sin\theta\sin\phi L_x - \sin\theta\cos\phi L_y + \cos\theta L_z$$

同様にして ξ, η, ζ 方向の単位ベクトル $\boldsymbol{\lambda}_\xi, \boldsymbol{\lambda}_\eta, \boldsymbol{\lambda}_\zeta$ を使って

$$I_\xi = \boldsymbol{\lambda}_\xi\cdot\mathbf{L} = (\cos\phi\cos\psi - \cos\theta\sin\phi\sin\psi)L_x$$

$$+(\sin\phi\cos\psi+\cos\theta\cos\phi\sin\psi)L_y+\sin\theta\sin\psi L_z$$

$$I_\eta=\boldsymbol{\lambda}_\eta\cdot\mathbf{L}=(-\cos\phi\sin\psi-\cos\theta\sin\phi\cos\psi)L_x$$

$$+(-\sin\phi\sin\psi+\cos\theta\cos\phi\cos\psi)L_y+\sin\theta\cos\psi L_z$$

$$I_\zeta=\boldsymbol{\lambda}_\zeta\cdot\mathbf{L}=\boldsymbol{\lambda}_\psi\cdot\mathbf{L}=\sin\theta\sin\phi L_x-\sin\theta\cos\phi L_y+\cos\theta L_z \tag{4}$$

が得られる．

（3），（4）より

$$I_\xi=\cos\psi I_\theta+\frac{\sin\psi}{\sin\theta}I_\phi-\frac{\cos\theta\sin\psi}{\sin\theta}I_\psi$$

$$I_\eta=-\sin\psi I_\theta+\frac{\cos\psi}{\sin\theta}I_\phi-\frac{\cos\theta\cos\psi}{\sin\theta}I_\psi$$

$$I_\zeta=I_\psi$$

または（2）を使って

$$I_\xi=\frac{\hbar}{i}\left[\cos\psi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\sin\psi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{\cos\theta\sin\psi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right]$$

$$I_\eta=\frac{\hbar}{i}\left[-\sin\psi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\psi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{\cos\theta\cos\psi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right] \tag{5}$$

$$I_\zeta=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\psi}$$

（5）が ϕ,θ,ψ を使って表わした剛体の各主軸のまわりの角運動量をあらわす微分演算子である[注]．

これを（1）に代入して得られるハミルトニアンは大変複雑だが，慣性モーメント $A=B$ のときには少し簡単になって

$$H=\frac{1}{2A}(I_\xi{}^2+I_\eta{}^2)+\frac{1}{2C}I_\zeta{}^2$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2A}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\psi^2}-2\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial\psi}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2C}\frac{\partial^2}{\partial\psi^2}$$

となる．これより定常解を与える Schrödinger 方程式 $H\psi=E\psi$ は

$$-\frac{\hbar^2}{2A}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}-2\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\psi}\right.$$

$$\left.+\left(\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}+\frac{A}{C}\right)\frac{\partial^2}{\partial\psi^2}\right]\psi=E\psi \tag{6}$$

で与えられる．

ここで問題にあるように，主軸ζのまわりの回転を考えないことにすれば，

$$\frac{\partial}{\partial\psi}\psi\equiv 0$$

であるから，(6) はさらに簡単になって方程式

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{2AE}{\hbar^2}\right]\psi=0 \qquad (7)$$

が得られる．これはまさに球面調和関数を与える微分方程式 (14.4) [〃] なので解は (14.16) [〃] を使って

$$\psi_{KM_K}(\psi,\theta,\phi)=Y_{KM_K}(\theta,\phi)$$
$$=\epsilon\left[\frac{2K+1}{4\pi}\frac{(K-|M_K|)!}{(K+|M_K|)!}\right]^{\frac{1}{2}}P_K^{M_K}(\cos\theta)e^{iM_K\phi} \qquad (8)$$

$$E_{KM_K}=\frac{1}{2A}K(K+1)\hbar^2$$
$$K=0,1,2,\cdots$$
$$M_K=K,K-1,\cdots,-K$$

が得られる．

〔注〕 (5) 式からわかるように I_ξ, I_η, I_ζ の満たす交換関係は

$$[I_\xi, I_\eta]=-i\hbar I_\zeta$$
$$[I_\eta, I_\zeta]=-i\hbar I_\xi$$
$$[I_\zeta, I_\xi]=-i\hbar I_\eta$$

または

$$\mathbf{I}\times\mathbf{I}=-i\hbar\mathbf{I}$$

となり右辺に負の符号があらわれる．(4) を使って $\mathbf{I}$ を $\mathbf{L}$ で表わした式を使うと一見通常の交換関係が導かれるようにみえるが，実は $\boldsymbol{\lambda}_\xi, \boldsymbol{\lambda}_\eta, \boldsymbol{\lambda}_\zeta$ が $\mathbf{L}$ と可換でないことを考慮して計算するとやはり上の式が得られる．

さて

$$\mathbf{I}^2=I_\xi{}^2+I_\eta{}^2+I_\zeta{}^2$$

とおけば $\mathbf{I}$ は I_ξ, I_η, I_ζ のいずれとも可換だから，$\mathbf{I}^2, I_\zeta$ を対角化することにし

$$I_\pm=I_\xi\mp iI_\eta$$

とおけば

$$[I_\pm, I_\zeta] = \mp\hbar I_\pm$$

$$[I_+, I_-] = 2\hbar I_\zeta$$

が得られる．これらの式は（27.18）のおのおのに対応する．§27-6,7 と同様な方法で有限次元の表現を構成すれば，

$$\mathbf{I}^2 = \hbar^2 K(K+1) \qquad K = 0, 1, 2, \cdots$$

$$I_\zeta = \hbar M_K \qquad M_K = K, K-1, \cdots, -K$$

が得られ，これよりエネルギー固有値は $A=B$ のときには

$$E = \frac{1}{2A}(I_\xi{}^2 + I_\eta{}^2) + \frac{1}{2C}I_\zeta{}^2$$

$$= \frac{1}{2A}(\mathbf{I}^2 - I_\zeta{}^2) + \frac{1}{2C}I_\zeta{}^2$$

$$= \left[\frac{1}{2A}K(K+1) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{C} - \frac{1}{A}\right)M_K{}^2\right]\hbar^2$$

となる．ζ 軸回りの回転がないとき $M_K=0$ とおけば（8）式に一致する．

問題XII-13　［第2版，XI-問13と同一］

二原子分子の回転準位間の遷移に対する選択則を導け．

〔解〕 二原子分子では原子間の力は Morse ポテンシャルで非常によく表わされる．二原子の運動は重心の運動を分離すれば，このポテンシャルの極小点の付近の微小振動と，原子間の距離を変えない回転運動とに分けられる．原子間の距離を固定した分子は2原子を結ぶ軸のまわりの慣性モーメントをもたず，それに垂直な軸のまわりの慣性モーメントの等しい剛体とみなせるので前問の結果を利用することができる．

次に二原子の電荷をそれぞれ e_1, e_2 とすると，電磁相互作用は

$$H' = \frac{ie_1\hbar}{m_1c}\mathbf{A}\cdot\nabla_1 + \frac{ie_2\hbar}{m_2c}\mathbf{A}\cdot\nabla_2$$

で与えられ，電気双極子近似のもとでの遷移確率はこれより

$$e_1\mathbf{r}_1 + e_2\mathbf{r}_2$$

の行列要素であらわされる．ここで相対座標 $\mathbf{r}$，および重心座標 $\mathbf{R}$ を

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \qquad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}$$

で導入し，重心座標を分離したとすれば，

$$e_1\mathbf{r}_1+e_2\mathbf{r}_2 \to e_1\frac{m_2}{m_1+m_2}\mathbf{r}-e_2\frac{m_1}{m_1+m_2}\mathbf{r}=\frac{e_1m_2-e_2m_1}{m_1+m_2}\mathbf{r}$$

となり，結局相対座標の行列要素を求めることに帰する．極座標を導入し

$$\mathbf{r}=(x, y, z)=(r\sin\theta\cos\phi, r\sin\theta\sin\phi, r\cos\theta)$$

とすれば，$\mathbf{r}$ が剛体の対称軸方向を向いていることを考慮すると，角変数 θ, ϕ はそのまま，前問で使った Euler の角の θ, ϕ に一致することになる．

これより行列要素 $\langle K'M_K'|\mathbf{r}|KM_K\rangle$ に対応する角部分の積分は

$$\int Y_{K'M_K'}{}^*(\theta,\phi)\begin{Bmatrix}\sin\theta\cos\phi\\ \sin\theta\sin\phi\\ \cos\theta\end{Bmatrix}Y_{KM_K}(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

である．ここで

$$\sin\theta\cos\phi=\sin\theta\frac{1}{2}(e^{i\phi}+e^{-i\phi})$$

$$\sin\theta\sin\phi=\sin\theta\frac{1}{2i}(e^{i\phi}-e^{-i\phi})$$

であるから選択則を調べることは，積分

$$\int Y_{K'M_K'}{}^*(\theta,\phi)\begin{Bmatrix}\sin\theta\, e^{i\phi}\\ \sin\theta\, e^{-i\phi}\\ \cos\theta\end{Bmatrix}Y_{KM_K}(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi \qquad (1)$$

を計算することに帰着する[注]．この計算については §46-1 [§37.1] に説明があるが，ここでもう一度繰返しておく．

(14.16) [〃] より

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=\epsilon\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}}P_l{}^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$

だから（1）の ϕ に関する積分は

$$\int_0^{2\pi}e^{-iM_K'\phi}\begin{Bmatrix}e^{i\phi}\\ e^{-i\phi}\\ 1\end{Bmatrix}e^{iM_K\phi}d\phi=2\pi\begin{Bmatrix}\delta_{M_K', M_K+1}\\ \delta_{M_K', M_K-1}\\ \delta_{M_K', M_K}\end{Bmatrix} \qquad (2)$$

となる．

θ に関する積分は，Legendre の陪関数に対する漸化式

$$wP_l^m(w)=\frac{l+|m|}{2l+1}P_{l-1}^m(w)+\frac{l-|m|+1}{2l+1}P_{l+1}^m(w)$$

$$\sqrt{1-w^2}P_l^m(w)=\frac{1}{2l+1}\left(P_{l+1}^{|m|+1}(w)-P_{l-1}^{|m|+1}(w)\right)$$

（ただし $l=0$ のときは $P_{l-1}^m(w)\equiv 0$ とおくものとする），および直交関係（14.15）[〃]

$$\int_{-1}^1 P_{l'}^m(w)P_l^m(w)dw=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\delta_{ll'}$$

を使えば計算できる．すなわち（2）を考慮すれば θ に関する積分は，

$$\int_{-1}^1 P_{K'}^{M_K'}(w)\begin{Bmatrix}\sqrt{1-w^2}\,\delta_{M_K',M_K+1}\\ \sqrt{1-w^2}\,\delta_{M_K',M_K-1}\\ w\quad\delta_{M_K',M_K}\end{Bmatrix}P_K^{M_K}(w)dw$$

$$=\begin{cases}\delta_{M_K',M_K+1}\displaystyle\int_{-1}^1 P_{K'}^{M_K+1}(w)\left[\frac{1}{2K+1}P_{K+1}^{M_K+1}(w)-\frac{1}{2K+1}P_{K-1}^{M_K+1}(w)\right]dw\\ \delta_{M_K',M_K-1}\displaystyle\int_{-1}^1 P_K^{M_K}(w)\left[\frac{1}{2K'+1}P_{K'+1}^{M_K}(w)-\frac{1}{2K'+1}P_{K'-1}^{M_K}(w)\right]dw\\ \delta_{M_K',M_K}\displaystyle\int_{-1}^1 P_{K'}^{M_K}(w)\left[\frac{K-M_K+1}{2K+1}P_{K+1}^{M_K}(w)+\frac{K+M_K}{2K+1}P_{K-1}^{M_K}(w)\right]dw\end{cases}$$

$$=\begin{cases}\dfrac{1}{2K+1}\dfrac{2}{2K+3}\dfrac{(K+M_K+2)!}{(K-M_K)!}\delta_{M_K'M_K+1}\delta_{K',K+1}\\ \qquad-\dfrac{1}{2K-1}\dfrac{2}{2K+1}\dfrac{(K+M_K)!}{(K-M_K-2)!}\delta_{M_K'M_K+1}\delta_{K'K-1}\\ -\dfrac{1}{2K+1}\dfrac{2}{2K+3}\dfrac{(K+M_K)!}{(K-M_K)!}\delta_{M_K'M_K-1}\delta_{K',K+1}\\ \qquad+\dfrac{1}{2K-1}\dfrac{2}{2K+1}\dfrac{(K+M_K)!}{(K-M_K)!}\delta_{M_K'M_K-1}\delta_{K',K-1}\\ \dfrac{K-M_K+1}{2K+1}\dfrac{2}{2K+3}\dfrac{(K+M_K+1)!}{(K-M_K+1)!}\delta_{M_K'M_K}\delta_{K',K+1}\\ \qquad+\dfrac{K+M_K}{2K-1}\dfrac{2}{2K+1}\dfrac{(K+M_K-1)!}{(K-M_K-1)!}\delta_{M_K'M_K}\delta_{K',K-1}\end{cases}\qquad(3)$$

これより $M_K>0$ のとき（1）は（2）（3）より

$$\int Y_{K'M_K'}^*(\theta,\phi)\begin{Bmatrix}\sin\theta\, e^{i\phi}\\ \sin\theta\, e^{-i\phi}\\ \cos\theta\end{Bmatrix}Y_{KM_K}(\theta,\phi)\sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$
=\begin{cases}
-\sqrt{\dfrac{(K+M_K+1)(K+M_K+2)}{(2K+1)(2K+3)}}\delta_{K',K+1}\delta_{M_K'M_K+1} \\
\qquad +\sqrt{\dfrac{(K-M_K)(K-M_K-1)}{(2K-1)(2K+1)}}\delta_{K',K-1}\delta_{M_K'M_K+1} \\
\sqrt{\dfrac{(K-M_K+1)(K-M_K+2)}{(2K+1)(2K+3)}}\delta_{K',K+1}\delta_{M_K'M_K-1} \\
\qquad -\sqrt{\dfrac{(K+M_K-1)(K+M_K)}{(2K-1)(2K+1)}}\delta_{K',K-1}\delta_{M_K'M_K-1} \\
\sqrt{\dfrac{(K+M_K+1)(K-M_K+1)}{(2K+1)(2K+3)}}\delta_{K',K+1}\delta_{M_K'M_K} \\
\qquad +\sqrt{\dfrac{(K+M_K)(K-M_K)}{(2K-1)(2K+1)}}\delta_{K',K-1}\delta_{M_K'M_K}
\end{cases} \tag{4}
$$

となる．$M_K=0$ および $M_K<0$ のときも同様の計算から（４）が M_K の正負にかかわらず成立することがわかる．これより電気双極子遷移に対する選択則は

$$\Delta K=\pm 1, \qquad \Delta M_K=0, \pm 1$$

であることがわかる．

〔注〕

$$Y_{1\pm 1}(\theta,\phi)=\mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}, \qquad Y_{10}(\theta,\phi)=\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta$$

であることを使えば，問題VIII-３の注で導びかれた関係式を利用し，さらに Clebsch-Gordan 係数の具体的な値を代入することにより（４）式に対応する行列要素を求めることができる．またこれを利用して x, y, z の行例式を求めた表式は問題XI-10解答中の式（14）に与えられている．

問題XII-14 ［第２版，XI-問14と同一］

二原子分子の二つの原子核が同一の場合および相異なる場合について，その振動遷移の選択則を調べよ．

〔**解**〕 前問の最初に述べられているように重心の運動を分離すると，遷移確率は

$$\mathbf{r}'=\frac{e_1m_2-e_2m_1}{m_1+m_2}\mathbf{r}$$

の行列要素を求めることに帰着する．ここで $\mathbf{r}$ は二原子核の相対座標である．もし二つの原子核が全く同じなら上の式で $e_1=e_2$，$m_1=m_2$ とすることによって，行列要素は恒

等的に零であることがわかる．したがって全く同じ原子からなる二原子分子では分子の回転および振動に伴なう電気双極子遷移は起こらない．

二つの原子核が相異なる場合には，一般に $\mathbf{r}'$ が恒等的に零となることはないので，もし振動が，ポテンシャルの極小点の付近での軸方向にそった一次元の調和振動型とすれば，問題XI-9より，調和振動をあらわす固有値 n を使って

$$\Delta n=\pm 1$$

という選択則が得られる．

問題XII-15　［第2版，XI-問15と同一］

(49.18)［40.18］の展開で無視した第五次および第六次の項の二原子分子の振動エネルギーへの寄与を求め，(49.21)［40.21］で与えられている $(v+\frac{1}{2})^2$ のエネルギーを導いた際にそれらの項を無視したことが正当化されることを示せ．調和振動子に対する x^5 および x^6 の行列要素を求めるのに行列法を用いよ．

〔**解**〕 (49.17)［40.17］の下式で与えられるポテンシャル $W(R)$ を (49.18)［40.18］のようにその最小点 $R=R_1$ のまわりで巾展開して六乗の項までとるとつけ加わる項は

$$-\frac{1}{4}\frac{U_0}{a^5}(R-R_1)^5+\frac{31}{360}\frac{U_0}{a^6}(R-R_1)^6 \qquad (1)$$

である．ここで各項の係数については (49.20)［40.20］で b, c を求めたときと同じように伸張の効果は無視している．

この摂動計算を行なうためには x^5 と x^6 の行列要素が必要になる．x の行列要素は (13.18)［〃］に，また x^2 の行列要素は (31.14) から二つ目の式［25.15］に与えられているから x^3 の行列要素は $\langle u|x^3|v\rangle=\sum_j\langle u|x|j\rangle\langle j|x^2|v\rangle$ より求まり零でないのは

$$\langle v+3|x^3|v\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^3}[(v+3)(v+2)(v+1)]^{\frac{1}{2}},$$

$$\langle v+1|x^3|v\rangle=\frac{3}{2\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^3}(v+1)^{\frac{3}{2}}, \qquad (2)$$

$$\langle v-1|x^3|v\rangle=\frac{3}{2\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^3}v^{\frac{3}{2}},$$

$$\langle v-3|x^3|v\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^3}[v(v-1)(v-2)]^{\frac{1}{2}}$$

のみである．そして x^5 の行列要素は x^2 と x^3 の行列要素より

$$\langle v+5|x^5|v\rangle=\frac{1}{4\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^5}[(v+5)(v+4)(v+3)(v+2)(v+1)]^{\frac{1}{2}},$$

$$\langle v+3|x^5|v\rangle=\frac{5}{4\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^5}[(v+3)(v+2)^3(v+1)]^{\frac{1}{2}},$$

$$\langle v+1|x^5|v\rangle=\frac{5}{4\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^5}[2(v+1)^2+1](v+1)^{\frac{1}{2}}, \tag{3}$$

$$\langle v-1|x^5|v\rangle=\frac{5}{4\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^5}[2v^2+1]v^{\frac{1}{2}},$$

$$\langle v-3|x^5|v\rangle=\frac{5}{4\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^5}[v(v-1)^3(v-2)]^{\frac{1}{2}},$$

$$\langle v-5|x^5|v\rangle=\frac{1}{4\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^5}[v(v-1)(v-2)(v-3)(v-4)]^{\frac{1}{2}}$$

となる．

$\langle v|x^5|v\rangle=0$ であるから x^5 からは二次の摂動ではじめて零でない寄与がありそれは

$$\mathrm{S}_{u}'\frac{|\langle u|x^5|v\rangle|^2}{E_v-E_u}=\frac{|\langle v+5|x^5|v\rangle|^2}{-5\hbar\omega}+\frac{|\langle v+3|x^5|v\rangle|^2}{-3\hbar\omega}$$
$$+\frac{|\langle v+1|x^5|v\rangle|^2}{-\hbar\omega}+\frac{|\langle v-1|x^5|v\rangle|^2}{\hbar\omega}+\frac{|\langle v-3|x^5|v\rangle|^2}{3\hbar\omega}$$
$$+\frac{|\langle v-5|x^5|v\rangle|^2}{5\hbar\omega}$$

で与えられ（3）よりこれは

$$\frac{1}{32\alpha^{10}}\frac{1}{\hbar\omega}\Big\{\frac{1}{5}[v(v-1)(v-2)(v-3)(v-4)$$
$$-(v+5)(v+4)(v+3)(v+2)(v+1)]$$
$$+\frac{25}{3}[v(v-1)^3(v-2)-(v+3)(v+2)^3(v+1)]$$
$$+25[(2v^2+1)^2v-(2(v+1)^2+1)^2(v+1)]\Big\}$$

となり，単調な計算の後 $(v+\frac{1}{2})$ について整理すると

$$-\frac{1}{\alpha^{10}}\frac{1}{\hbar\omega}\left[\frac{315}{16}\left(v+\frac{1}{2}\right)^4+\frac{1085}{32}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{1107}{256}\right] \tag{4}$$

となる．また x^6 の項については一次の摂動が零でなくそれは（２）を用いて

$$\langle v|x^6|v\rangle=\langle v|x^3|v+3\rangle\langle v+3|x^3|v\rangle+\langle v|x^3|v+1\rangle\langle v+1|x^3|v\rangle$$
$$+\langle v|x^3|v-1\rangle\langle v-1|x^3|v\rangle+\langle v|x^3|v-3\rangle\langle v-3|x^3|v\rangle$$
$$=\frac{1}{8}\frac{1}{\alpha^6}[(v+3)(v+2)(v+1)+9(v+1)^3+9v^3+v(v-1)(v-2)]$$
$$=\frac{1}{\alpha^6}\left[\frac{5}{2}\left(v+\frac{1}{2}\right)^3+\frac{25}{8}\left(v+\frac{1}{2}\right)\right] \qquad (5)$$

で与えられる．

今の場合

$$\alpha=\left(\frac{MK_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}}, \qquad \omega=\left(\frac{K_0}{M}\right)^{\frac{1}{2}}$$

であるからこれを（４）に代入し K_0 としては伸張の効果を無視して $K_0=2U_0/a^2$ とすると（１）の第一項からの二次の摂動エネルギーは

$$-\frac{1}{64}\frac{\hbar^2}{Ma^2}\left(\frac{\hbar^2}{2MU_0a^2}\right)\left[\frac{315}{16}\left(v+\frac{1}{2}\right)^4+\frac{1085}{32}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{1107}{256}\right] \qquad (6)$$

となる．また（１）の第二項からの一次の摂動エネルギーは（５）より

$$\frac{31}{720}\frac{\hbar^2}{Ma^2}\left(\frac{\hbar^2}{2MU_0a^2}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{5}{2}\left(v+\frac{1}{2}\right)^3+\frac{25}{8}\left(v+\frac{1}{2}\right)\right] \qquad (7)$$

となる．

（６）と（７）を見比べるとわかるようにこの二項は相殺することはなく（49.21）[40.21] までで求められたエネルギーレベル

$$E=-U_0+\frac{\hbar^2K(K+1)}{2MR_0^2}-\frac{\hbar^4K^2(K+1)^2a^2}{4M^2R_0^6U_0}$$
$$+\frac{\hbar^2}{Ma^2}\left(\frac{\hbar^2}{2MU_0a^2}\right)^{-\frac{1}{2}}\left[1-\frac{3\hbar^2K(K+1)a}{4MR_0^2U_0R_0}\left(1-\frac{a}{R_0}\right)\right]\left(v+\frac{1}{2}\right)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2 \qquad (8)$$

に（６）と（７）の項を加えると（８）の定数項，$(v+\frac{1}{2})$ の係数．$(v+\frac{1}{2})^2$ の係数がすべて変わってくることになる．

これでは題意に反する結論が導かれたことになるが，摂動計算を正しく行なえばやはり相殺が起こりその結果として（８）はそのまま成り立つのである．この摂動計算が正

しくない理由は（1）の二項のみをとり出して摂動エネルギーを計算し，他の同等に計算されねばならない摂動エネルギー（相殺する相手）を無視していることにある．

それでは同等に計算されねばならない摂動エネルギーはいかなるものであるかを見るために本文中で行なわれている近似の仕方を詳しく調べよう．そのためにエネルギーの次元をもつ量κと無次元の量βを

$$\kappa=\frac{\hbar^2}{Ma^2},\qquad \beta=\left(\frac{\hbar^2}{2MU_0a^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

で導入する．そしてこれを用いて（8）を書き直すと

$$\begin{aligned}E=&-\frac{1}{2}\kappa\beta^{-2}\left(1-\left(\frac{a}{R_0}\right)^2K(K+1)\beta^2+\left(\frac{a}{R_0}\right)^6K^2(K+1)^2\beta^4\right)\\&+\kappa\beta^{-1}\left[1-\frac{3}{2}\left(\frac{a}{R_0}\right)^3\left(1-\frac{a}{R_0}\right)K(K+1)\beta^2\right]\left(v+\frac{1}{2}\right)\\&-\frac{1}{2}\kappa\left(v+\frac{1}{2}\right)^2\end{aligned}\tag{9}$$

となり，$\kappa\beta^{-2}$ の項（定数項）には伸張の効果を二次までとり入れ，$\kappa\beta^{-1}$ の項（$(v+\frac{1}{2})$の係数）には一次までとり入れ $\kappa\beta^0$ の項（$(v+\frac{1}{2})^2$ の係数）では伸張の効果を無視していることがわかる．したがって高次の摂動エネルギーを計算して $\kappa\beta^n\times$[v の関数]（$n=1,2,\cdots$）という項がでてくれば $K=0$ と見なしてもよいのである．（（7）は $\kappa\beta$ を因子にもち（6）は $\kappa\beta^2$ を因子にもっており実際それらの項では伸張の効果を無視している.）

ここで摂動の一般論を行なうためにポテンシャルを

$$W(R)=W_0+\frac{1}{2}K_0(R-R_1)^2+\sum_{n=3}^{\infty}a_n(R-R_1)^n$$

と展開し $H_n=a_n(R-R_1)^n$（$n=3,4,\cdots$）とおく．そのとき $H'=\sum_{n\geqq3}H_n$ の m 次の摂動エネルギーは

$$\frac{\langle v|H'|v_1\rangle\langle v_1|H'|v_2\rangle\cdots\langle v_{m-2}|H'|v_{m-1}\rangle\langle v_{m-1}|H'|v\rangle}{(E_v-E_{v_1})(E_v-E_{v_2})\cdots(E_v-E_{v_{m-2}})(E_v-E_{v_{m-1}})}$$

というような項の和でありこれらはそれぞれ

$$\frac{\langle v|H_{n_1}|v_1\rangle\langle v_1|H_{n_2}|v_2\rangle\cdots\langle v_{m-2}|H_{n_{m-1}}|v_{m-1}\rangle\langle v_{m-1}|H_{n_m}|v\rangle}{(E_v-E_{v_1})(E_v-E_{v_2})\cdots(E_v-E_{v_{m-2}})(E_v-E_{v_{m-1}})}$$

の和になっている．$K=0$ のとき $a\alpha=\beta^{-\frac{1}{2}}$, $2U_0=\kappa\beta^{-2}$, $\hbar\omega=\kappa\beta^{-1}$ が成り立つことに注意してこの項の因子を求めよう．$K=0$ のとき $a_n\propto U_0/a^n$ であるから $\langle H_n\rangle$ は

$U_0(a\alpha)^{-n}$ を因子としてもちこれは $\kappa\beta^{n/2-2}$ を因子として持つことを意味している．したがって上の項は

$$\kappa\beta^{n_1/2-2}\times\kappa\beta^{n_2/2-2}\times\cdots\times\kappa\beta^{n_m/2-2}/(\kappa\beta^{-1})^{m-1}$$
$$=\kappa\cdot\beta^{(n_1+n_2+\cdots+n_m)/2-m-1}$$

を因子として持つことがわかる．ここで $n_1+n_2+\cdots+n_m$ が奇数なら選択則により行列要素が零になるから高次の零でない摂動エネルギーはすべて $\kappa\beta^n$ (n は整数) という因子をもちしかも $n_i\geqq3$ ($i=1,2,\cdots,m$)，$m\geqq1$ より $n\geqq0$ となる．

たとえば $\kappa\beta^0$ を因子としてもつのは一次の ($m=1$) のエネルギーでは $H_4(n_1=4)$ の項のみであり，二次の ($m=2$) エネルギーでは $H_3(n_1=n_2=3)$ の項のみでありそれ以外にはない．そして本文中に示されているようにこの二項の定数項の間に相殺が起こったのである．また $\kappa\beta$ を因子としてもつのは（7）の項 ($m=1$；$n_1=6$) の他に ($m=2$；$n_1=5, n_2=3$)，($m=2$；$n_1=n_2=4$)，($m=3$；$n_1=4$, $n_2=n_3=3$)，($m=4$；$n_1=n_2=n_3=n_4=3$) がありこれらをすべて計算しなければ相殺が起こるかどうかを見ることはできない．同様に $\kappa\beta^2$ を因子としてもつのは（6）の項 ($m=2$；$n_1=n_2=5$) の他に ($m=1$；$n_1=8$)，($m=2$；$n_1=7$, $n_2=3$)，($m=2$；$n_1=6$, $n_2=4$)，($m=3$；$n_1=6$, $n_2=n_3=3$)，($m=3$；$n_1=5$, $n_2=4$, $n_3=3$)，($m=3$；$n_1=n_2=n_3=4$)，($m=4$；$n_1=5$, $n_2=n_3=n_4=3$)，($m=4$；$n_1=n_2=4$, $n_3=n_4=3$)，($m=5$；$n_1=4$, $n_2=n_3=n_4=n_5=3$)，($m=6$；$n_1=n_2=n_3=n_4=n_5=n_6=3$) がありこれらは（6）と同等に計算しなければならない項である．

一般に $\kappa\beta^n(n=1,2,\cdots)$ を因子とする項の間に相殺が起こるかどうかを確かめるのは実際上不可能なことであるが，この場合には $K=0$ としてもよいことに注目し，$K=0$ のときには Morse ポテンシャルの問題は“正確”に解けてエネルギーレベルが求まるからそれと（9）とを比較すると相殺が起こるかどうかを摂動計算することなしに見ることができる．

以下本文中に引用されている Morse の原論文［P. M. Morse : “Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels”, ***Physical Review* 34**, pp. 57～64 (1929)］にしたがってエネルギーレベルを求めよう．解くべき Schrödinger 方程式は (49.17) [40.17] で $K=0$ とおいて

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\chi}{dR^2}+U(R)\chi=E\chi \qquad (10)$$

であり Morse ポテンシャルUは (49.16) [40.16] により

$$U(R)=U_0(e^{-2(R-R_0)/a}-2e^{-(R-R_0)/a})$$

で与えられている. (10) の解χに課す境界条件としては $R=0$ と $R\to\infty$ で零になるとすべきであるが, 本文中にも行なわれているようにRを $-\infty$ から ∞ までの値をとれるものとし (三次元の問題を一次元の問題であるかのように見なすこと) χ は $R\to\pm\infty$ で零になるという境界条件を課すことにする. そうすると (10) は正確に解けるのである. まず変数変換

$$y=e^{-(R-R_0)/a}$$

を行なうと (10) は

$$\frac{d^2\chi}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d\chi}{dy}+\frac{2Ma^2}{\hbar^2}\left(\frac{E}{y^2}+\frac{2U_0}{y}-U_0\right)\chi=0 \tag{11}$$

となる. Rは $-\infty$ から $+\infty$ までの値をとれるものとしたからyは0から ∞ までの値をとり, 方程式 (11) で $y\approx 0$, あるいは $y\approx\infty$ としてχを求めると, χの原点近くおよび無限遠点近くにおける期待されるふるまいとして

$$\chi(y)\approx y^{+\left(\frac{2Ma^2}{\hbar^2}(-E)\right)^{\frac{1}{2}}} \qquad (y\approx 0),$$

$$\chi(y)\approx e^{-\left(\frac{2Ma^2U_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}y} \qquad (y\approx\infty)$$

を得るから

$$E\equiv-\frac{\hbar^2b^2}{8Ma^2}=-\frac{\kappa}{8}b^2 \qquad (b>0),$$

$$\left(\frac{2Ma^2U_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}y=\frac{y}{\beta}\equiv\frac{z}{2}$$

および

$$\chi=e^{-z/2}\cdot z^{b/2}\cdot F(z)$$

とおくと, つまりχから $y\approx 0$ および $y\approx\infty$ での期待されるふるまいをくくり出しておくと, Fの満たすべき微分方程式として

$$z\frac{d^2F}{dz^2}+(b+1-z)\frac{dF}{dz}+\left(\frac{1}{\beta}-\frac{b+1}{2}\right)F=0$$

を得る. これが多項式解を持つ場合にのみχに対する境界条件は満たされ, そのためには

$$\frac{1}{\beta}-\frac{b+1}{2}=v \qquad (v=0, 1, 2, \cdots) \tag{12}$$

でなければならず，そのとき F は Laguerre の陪多項式

$$L_v^{(b)}(z)=\frac{e^z z^{-b}}{v!}\frac{d^v}{dz^v}(e^{-z}z^{v+b})$$

を解にもつ．(12) より

$$b=\frac{2}{\beta}-2\left(v+\frac{1}{2}\right)$$

となり $b>0$ の条件より v のとりうる値は $0\leqq v<1/\beta-\frac{1}{2}$ であることがわかり，束縛状態が存在するためには $\beta<2$ でなければならない．そしてそのとき束縛エネルギーは

$$E=-\frac{\kappa}{8}b^2=-\frac{1}{2}\kappa\beta^{-2}+\kappa\beta^{-1}\left(v+\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{2}\kappa\left(v+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{13}$$

となり，これは (9) で $K=0$ とおいたエネルギーレベルに一致している．したがって $K=0$ の場合にも本文中で行なわれているような摂動計算を行なうと高次の摂動であらわれる $\kappa\beta^n (n=1, 2, \cdots)$ を因子とする項はすべて相殺して (13) で与えられているごとく $\kappa\beta^{-2}, \kappa\beta^{-1}, \kappa$ を因子としてもつ項のみが生き残るはずである．$K\neq 0$ の場合には正確なエネルギーレベルは求まらないが，本文中に行なわれている近似を採用するとエネルギーレベルは (13) において $\kappa\beta^{-2}$ の項には伸張の二次の補正があらわれ，$\kappa\beta^{-1}$ の項には一次の補正があらわれ，そして κ の項には補正があらわれず，より高次の $\kappa\beta^n$ $(n\geqq 1)$ の項は $K=0$ として摂動計算してよいからすべて相殺して零になり結果としてエネルギーレベル (9) が得られるのである．

問題XII-16　［第2版，XI-問16と同一］

中性子と陽子との相互作用は，それらが一重項状態にあるときにも三重項状態にあるときも等しく井戸型で表わされるものと仮定すると，重水素の束縛エネルギー ($l=0$) と遅い中性子の散乱断面積の両方に適合するような a の値は存在するか？　もし存在するならそれはどれくらいか．

〔解〕 中性子-陽子の一重状態および三重状態が同じ井戸型ポテンシャル

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & 0\leqq r<a \\ 0, & r>a\end{cases}$$

で相互作用しているとするとこの散乱の零エネルギーでの全断面積は（19.28）［ 〃 ］より

$$\sigma=4\pi a^2\left(1-\frac{\tan\gamma a}{\gamma a}\right)^2 \tag{1}$$

で与えられる．ここに

$$\gamma=\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}},\qquad \mu=\frac{m_p m_n}{m_p+m_n}$$

である．また重水素はこの井戸型ポテンシャルの $l=0$ の束縛状態でその束縛エネルギーを ϵ とすると関係式（15.3）［ 〃 ］:

$$\alpha\cot\alpha a=-\beta \tag{2}$$

が満たされていなければならない．ここに

$$\alpha=\sqrt{\frac{2\mu(V_0-\epsilon)}{\hbar^2}},\qquad \beta=\sqrt{\frac{2\mu\epsilon}{\hbar^2}}$$

である．

ここで σ と ϵ に実験データより定まる数値を与えて V_0 と a とを求めるのであるが全断面積 σ のかわりに散乱の長さ $a_t(=a_s)$（問題XII-17参照）を導入しておく方が便利である．a_t は

$$a_t=a\left(1-\frac{\tan\gamma a}{\gamma a}\right) \tag{3}$$

で定義され，これにより $\sigma=4\pi a_t^2$ と書けるから実験データ $\sigma=20.4\times10^{-24}\,\mathrm{cm}^2$ より

$$a_t=\pm1.274\times10^{-12}\,\mathrm{cm}$$

を得る．問題IV-7と同様に $a_0=2.00\times10^{-13}\,\mathrm{cm}$ とし $\hbar=c=a_0=1$ の単位系を採用すると

$$a_t=\pm6.37 \tag{4}$$

となる．またそのときの結果を用いると

$$\beta=0.464$$

である．

計算の図式として a を与え（2）より αa を $\pi/2<\alpha a<\pi$ の範囲内で求め，$\gamma a=\sqrt{(\alpha a)^2+(\beta a)^2}$ より γa を定めて（3）より a_t を求める．そして a_t を a の関数として図示すると大体次図のようになる．

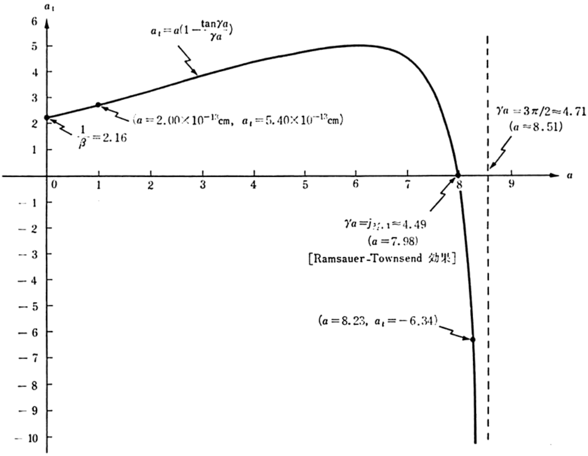


図　27

したがって $\pi/2<\gamma a\leqq3\pi/2$ の範囲内（束縛状態がただ一つ存在するための条件）では $a_t=+6.37$ の解はなく，$a_t=-6.37$ の解が $a=8.23$ ($\gamma a=4.59$) のあたりにある．これをもとの単位系になおすと

$$a=1.65\times10^{-12}\,\mathrm{cm}$$

$$(V_0=3.23\mathrm{Mev})$$

となる．

問題XII-17　［第2版，XI-問17と同一］

重水素の束縛エネルギーの値を用いて，三重状態における井戸型ポテンシャルの有効領域を（50.11）[41.11] 式および（50.12）[41.12] 式より算出してそれらを比較せよ．ただし $a=2\times10^{-13}$ cm と仮定せよ．

〔解〕 $l=0$ の波の散乱の長さ a_t と有効距離 r_t とは（39.39）により

$$k\cot\delta_0(k)=-\frac{1}{a_t}+\frac{1}{2}r_tk^2+\cdots \qquad (1)$$

で定義されている．深さ $-V_0$，半径 a の井戸型ポテンシャルによる $l=0$ の位相のずれは問題V-7で計算されておりそれを用いると（1）の左辺は

$$\frac{-\dfrac{1}{a}\cos\sqrt{\gamma^2+k^2}a\cos ka-k\sin ka\dfrac{\sin\sqrt{\gamma^2+k^2}a}{\sqrt{\gamma^2+k^2}a}}{\cos\sqrt{\gamma^2+k^2}a\dfrac{\sin ka}{ka}-\cos ka\dfrac{\sin\sqrt{\gamma^2+k^2}a}{\sqrt{\gamma^2+k^2}a}} \tag{2}$$

で与えられることがわかる．ただし

$$\gamma=\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}$$

とおいた．（2）を ka が小さいとして展開すると

$$-\frac{1}{a}\frac{1}{1-\dfrac{\tan\gamma a}{\gamma a}}$$
$$+\frac{1}{2}a\left\{1-\frac{1}{(\gamma a)^2}\cdot\frac{1}{1-\dfrac{\tan\gamma a}{\gamma a}}-\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{\left(1-\dfrac{\tan\gamma a}{\gamma a}\right)^2}\right\}k^2+\cdots$$

となるから（1）の右辺と比較して

$$a_t=a\left(1-\frac{\tan\gamma a}{\gamma a}\right), \tag{3}$$

および

$$r_t=a\left\{1-\frac{1}{(\gamma a)^2}\frac{a}{a_t}-\frac{1}{3}\left(\frac{a}{a_t}\right)^2\right\} \tag{4}$$

を得る．

一方（50.11）[41.11] で与えられている $\rho(0,0)$ は定義により（4）で求めた r_t と一致しているのであるが念のため計算しておこう．

$$\rho(0,0)=2\int_0^\infty(\psi_0{}^2-u_0{}^2)dr \tag{5}$$

において ψ_0 は（50.10）[41.10] により

$$\psi_0(r)=1-\frac{r}{a_t}, \qquad r\geqq 0$$

で与えられており，u_0 は $r>a$ では ψ_0 と一致し：

$$u_0(r)=1-\frac{r}{a_t}, \qquad r>a$$

$0 \leqq r < a$ では

$$u_0(r) = A\sin\gamma r, \qquad a > r \geqq 0$$

となる．定数Aは $r=a$ での連続条件より

$$A = \frac{1}{\sin\gamma a}\left(1 - \frac{a}{a_t}\right)$$

で与えられる．（一階導関数の $r=a$ における連続条件より（3）が導かれる）これらを（5）の右辺に代入すると

$$\rho(0,0) = 2\int_0^a \left\{\left(1-\frac{r}{a_t}\right)^2 - \frac{1}{\sin^2\gamma a}\left(1-\frac{a}{a_t}\right)^2 \sin^2\gamma r\right\} dr$$

$$= \frac{2}{3}a_t\left\{1 - \left(1-\frac{a}{a_t}\right)^3\right\} - \frac{a}{\sin^2\gamma a}\left(1-\frac{a}{a_t}\right)^2\left(1 - \frac{\sin\gamma a\cos\gamma a}{\gamma a}\right)$$

となり（3）を用いて変形すると

$$\rho(0,0) = a\left\{1 - \frac{1}{(\gamma a)^2}\frac{a}{a_t} - \frac{1}{3}\left(\frac{a}{a_t}\right)^2\right\} \tag{6}$$

となり（4）の r_t と一致していることがわかる．

また（50.12）［41.12］で定義されている

$$\rho(-\epsilon, -\epsilon) = 2\int_0^\infty (\psi_g{}^2 - u_g{}^2)dr$$

において

$$\psi_g(r) = e^{-\beta r}, \qquad r \geqq 0$$

$$u_g(r) = \begin{cases} B\sin\alpha r, & a > r \geqq 0 \\ e^{-\beta r}, & r > a \end{cases}$$

ただし

$$\alpha = \sqrt{\frac{2\mu(V_0-\epsilon)}{\hbar^2}}, \qquad \beta = \sqrt{\frac{2\mu\epsilon}{\hbar^2}}, \qquad B = \frac{e^{-\beta a}}{\sin\alpha a}$$

を代入して積分を行なうと

$$a\left\{\frac{1}{\beta a}(1-e^{-2\beta a}) - \frac{1}{\sin^2\alpha a}e^{-2\beta a}\left(1 - \frac{\sin\alpha a\cos\alpha a}{\alpha a}\right)\right\}$$

となる．$r=a$ における一階導関数の連続条件より束縛エネルギーに対する方程式（15.3）［ 〃 ］：

$$\alpha\cot\alpha a = -\beta$$

が得られるからこれを用いて上式を変形すると

$$\rho(-\epsilon,-\epsilon)=a\left\{\frac{1}{\beta a}(1-e^{-2\beta a})-e^{-2\beta a}\left(1+\frac{(\beta a)^2+\beta a}{(\alpha a)^2}\right)\right\} \qquad (7)$$

となる．

ここで重水素に対するデータを用いて（6），（7）で与えられている $\rho(0,0)$，$\rho(-\epsilon,-\epsilon)$ の値を求めよう．状況は問題IV-7と全く同じであるからその結果が使えて

$$\alpha a=1.82, \qquad \beta a=0.464, \qquad \gamma a=1.88$$

となりこれより

$$\rho(0,0)=0.845\times a=1.69\times 10^{-13}\,\mathrm{cm},$$

$$\rho(-\epsilon,-\epsilon)=0.828\times a=1.66\times 10^{-13}\,\mathrm{cm}$$

を得る．したがってこれら二つの相対誤差は2％くらいである．

なお散乱の長さ a_t は $2.64\times a=5.28\times 10^{-13}\,\mathrm{cm}$ でありこれより中性子—陽子散乱の零エネルギーでの全断面積への三重状態からの寄与は $(3/4)\cdot 4\pi a_t^2=2.6\times 10^{-24}\,\mathrm{cm}^2$ くらいであることがわかる．

問題XII-18 ［第2版，XI-問18に対応］

スピン交換の演算子 $\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P)$ が本文でのべた性質をもつことを示せ．ついで，(23.38) 式を利用して一重項および三重項状態の射影演算子をつくれ．最後に三重項のポテンシャルエネルギーを $V_t(r)$，一重項のそれを $V_S(r)$ として，中性子-陽子相互作用を記述するスピンを含んだ単一のポテンシャルエネルギーをつくれ．

〔解〕 陽子，中性子に対するスピン行列は (41.3) [33.3] で与えられる．Pauli のスピン行列を使うと，

$$\mathbf{S}_P=\tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}_P, \qquad \mathbf{S}_N=\tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}_N$$

と書くことができる．ただし $\boldsymbol{\sigma}_P$ は陽子に対するスピン波動関数 $v_P(\frac{1}{2}), v_P(-\frac{1}{2})$ のみに作用し，$\boldsymbol{\sigma}_N$ は $v_N(\frac{1}{2}), v_N(-\frac{1}{2})$ のみに作用するものとする．また §41 [§33] と同じように

$$v_P(\tfrac{1}{2})v_N(\tfrac{1}{2})=(++), \qquad v_P(\tfrac{1}{2})v_N(-\tfrac{1}{2})=(+-), \cdots$$

などと表わすと，(41.5) [33.5] を使って $\boldsymbol{\sigma}_N^2, \boldsymbol{\sigma}_P^2, (\boldsymbol{\sigma}_N+\boldsymbol{\sigma}_P)^2$ の固有値，および $\boldsymbol{\sigma}_N\cdot$

$\boldsymbol{\sigma}_P=\frac{1}{2}[(\boldsymbol{\sigma}_N+\boldsymbol{\sigma}_P)^2-\boldsymbol{\sigma}_N{}^2-\boldsymbol{\sigma}_P{}^2]$ より $\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P$ の固有値が求まる．方法は問題X-4と同じであり，その結果は

		$\boldsymbol{\sigma}_N{}^2$	$\boldsymbol{\sigma}_P{}^2$	$(\boldsymbol{\sigma}_N+\boldsymbol{\sigma}_P)^2$	$\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P$	$\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P)$
三重項	$(++)$	3	3	8	1	1
三重項	$\sqrt{\frac{1}{2}}[(+-)+(-+)]$	3	3	8	1	1
三重項	$(--)$	3	3	8	1	1
一重項	$\sqrt{\frac{1}{2}}[(+-)-(-+)]$	3	3	0	-3	-1

である．

したがって，三重項，一重項のスピン波動関数はそれぞれ $\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P)$ の固有値 1，および -1 に属す固有関数である．

次に（23.38）において

$$\Omega\to\tfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P),\quad \omega_1\to1\ (\text{三重項}),\quad \omega_2\to-1\ (\text{一重項})$$

とすれば，三重項および一重項に対する射影演算子 P_t, P_s が得られる．すなわち

$$\text{三重項}\quad P_t=\frac{\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P)-(-1)}{1-(-1)}=\frac{3}{4}+\frac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P$$

$$\text{一重項}\quad P_s=\frac{\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P)-1}{-1-1}=\frac{1}{4}-\frac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P$$

となる．これより陽子，中性子間のポテンシャルは

$$\begin{aligned}V_{NP}(r)&=V_t(r)P_t+V_s(r)P_s\\&=(\tfrac{3}{4}+\tfrac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P)V_t(r)+(\tfrac{1}{4}-\tfrac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P)V_s(r)\end{aligned}$$

と表わされる．

問題XII-19　［第2版，XI-問20と同一］

§21［§20］の議論を用いて，位相のずれが δ_0（それ以外は零）をもつ陽子—陽子散乱と（50.16）で与えられる Mott 散乱との比の表式を求めよ．

〔**解**〕陽子-陽子のクーロン散乱で $l=0$ でのみ位相のずれ δ_l が零でないとすると（21.27）［20.24］より

$$f_0(\theta)=f_c(\theta)+\frac{1}{k}e^{i(2\eta_0+\delta_0)}\sin\delta_0P_0(\cos\theta)$$

これを $s=\frac{1}{2}$ のときの（41.2）［33.2］式：

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+\frac{(-1)^{2s}}{2s+1}2R_e[f(\theta)f^*(\pi-\theta)]$$

に代入して

$$\sigma_0(\theta)=\underset{\sim\sim\sim}{|f_c(\theta)|^2}+2R_e\left\{f_c(\theta)\frac{1}{k}\sin\delta_0 e^{-i(2\eta_0+\delta_0)}\right\}+\frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0$$

$$+\underset{\sim\sim\sim}{|f_c(\pi-\theta)|^2}+2R_e\left\{f_c(\pi-\theta)\frac{1}{k}\sin\delta_0 e^{-i(2\eta_0+\delta_0)}\right\}+\frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0$$

$$-\underset{\sim\sim\sim}{R_e\{f_c(\theta)f_c^*(\pi-\theta)\}}-\frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0$$

$$-R_e\left\{f_c(\theta)\frac{1}{k}\sin\delta_0 e^{-i(2\eta_0+\delta_0)}\right\}-R_e\left\{f_c^*(\pi-\theta)\frac{1}{k}\sin\delta_0 e^{+i(2\eta_0+\delta_0)}\right\}$$

〰〰をつけた項は Mott 散乱の散乱断面積 (50.16) [41.16] を与えるので

$$=\sigma_{\text{mott}}(\theta)$$

$$+\frac{n}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}\frac{1}{k}\sin\delta_0\cos[n\ln(\sin^2\tfrac{1}{2}\theta)+\delta_0-\pi]+\frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0$$

$$+\frac{n}{2k\cos^2\frac{1}{2}\theta}\frac{1}{k}\sin\delta_0\cos[n\ln(\cos^2\tfrac{1}{2}\theta)+\delta_0-\pi]+\frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0$$

$$-\frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0$$

ここで

$$n=\frac{\mu e^2}{\hbar^2 k}=\frac{e^2}{\hbar v},\qquad \hbar k=p=\mu v$$

を使うと

$$\sigma_0(\theta)=\sigma_{\text{mott}}(\theta)-\frac{1}{2}\frac{e^2}{\hbar v}\left(\frac{\hbar}{\mu v}\right)^2\sin\delta_0\left\{\operatorname{cosec}^2\tfrac{1}{2}\theta\cos\left[\frac{e^2}{\hbar v}\ln(\sin^2\tfrac{1}{2}\theta)+\delta_0\right]\right.$$

$$\left.+\sec^2\tfrac{1}{2}\theta\cos\left[\frac{e^2}{\hbar v}\ln(\cos^2\tfrac{1}{2}\theta)+\delta_0\right]\right\}+\left(\frac{\hbar}{\mu v}\right)^2\sin^2\delta_0$$

$$=\sigma_{\text{mott}}(\theta)$$

$$+\left(\frac{\hbar}{\mu v}\right)^2\sin\delta_0\left\{\sin\delta_0-\frac{e^2}{2\hbar v}\operatorname{cosec}^2\tfrac{1}{2}\theta\cos\left[\frac{e^2}{\hbar v}\ln(\sin^2\tfrac{1}{2}\theta)+\delta_0\right]\right.$$

$$\left.-\frac{e^2}{2\hbar v}\sec^2\tfrac{1}{2}\theta\cos\left[\frac{e^2}{\hbar v}\ln(\cos^2\tfrac{1}{2}\theta)+\delta_0\right]\right\}$$

これより

$$\frac{\sigma_0(\theta)}{\sigma_{\text{mott}}(\theta)}=1+\left(\frac{\hbar}{\mu v}\right)^2\sin\delta_0\left\{\sin\delta_0-\frac{e^2}{2\hbar v}\operatorname{cosec}^2\tfrac{1}{2}\theta\cos\left[\frac{e^2}{\hbar v}\ln(\sin^2\tfrac{1}{2}\theta)+\delta_0\right]\right.$$
$$\left.-\frac{e^2}{2\hbar v}\sec^2\tfrac{1}{2}\theta\cos\left[\frac{e^2}{\hbar v}\ln(\cos^2\tfrac{1}{2}\theta)+\delta_0\right]\right\}\Big/\sigma_{\text{mott}}(\theta)$$

ただし

$$\sigma_{\text{mott}}(\theta)=\left(\frac{e^2}{2\mu v^2}\right)^2\left\{\operatorname{cosec}^4\tfrac{1}{2}\theta+\sec^4\tfrac{1}{2}\theta\right.$$
$$\left.-\operatorname{cosec}^2\tfrac{1}{2}\theta\sec^2\tfrac{1}{2}\theta\cos\left[\frac{e^2}{\hbar v}\ln(\tan^2\tfrac{1}{2}\theta)\right]\right\}$$

$\delta_0=0$ のときにはこの比は 1 となる.

第 XIII 章

相対論的波動方程式

問題XIII-1　［第2版，XII-問**2**と同一］

(51.11) [42.11] および それに つづく議論の 中に 示されている非相対論的近似を用いて，Pに対する表式 (51.8) [42.8] が， 適当な 極限をとれば (7.1) [〃] に帰着することを示せ.

〔**解**〕 (51.11) [42.11]，つまり

$$\psi(\mathbf{r},t)=\psi'(\mathbf{r},t)e^{-imc^2t/\hbar}$$

とおき両辺を t で偏微分すると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left(mc^2\psi'+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'\right)e^{-imc^2t/\hbar}$$

を得る. ここで $mc^2\psi'$ に比べて $i\hbar\partial\psi'/\partial t$ を小さいとして無視する. つまり静止エネルギーに比べて運動エネルギーが無視できるという意味で非相対論的極限をとると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\approx mc^2\psi' e^{-imc^2t/\hbar}=mc^2\psi$$

となるから (51.8) [42.8] で与えられる $P(\mathbf{r},t)$ は上式より

$$P(\mathbf{r},t)=\frac{1}{2mc^2}\left(\psi^*i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\left(i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^*\right)\approx|\psi(\mathbf{r},t)|^2$$

と近似されこれは (7.1) [〃] と一致する.

問題XIII-2　［第2版，XII-問**3**と同一］

深さ V_0, 半径 a の角井戸型の引力ポテンシャルに対する Schrödinger の相対論的方程式について， $r=a$ での連続条件を求めた上で， この方程式を解け. なお a が与えられているとき， 質量 m の粒子を丁度束縛するに足るような最小の V_0 を与える具体的な表式を導け.

〔解〕 球対称ポテンシャルであるから波動関数を変数分離して

$$\psi(\mathbf{r}, t) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi) e^{-iEt/\hbar}$$

とおくと Schrödinger の相対論的方程式は (51.14) [42.14] で $e\phi$ を V で置き変えたもの，つまり

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=\frac{(E-V)^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}R,$$

$$l=0,1,2,\cdots \tag{1}$$

となる．ここでポテンシャル V は

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & 0\leqq r<a\\ 0, & r>a\end{cases}$$

で与えられる．（1）の $0\leqq r<a$ での解を $R_{\rm in}$, $r>a$ での解を $R_{\rm out}$ とすると $r=a$ での連続性条件は

$$R_{\rm in}(a)=R_{\rm out}(a)$$

$$R_{\rm in}'(a)=R_{\rm out}'(a)$$

である．

方程式（1）を具体的に書くと

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{(E+V_0)^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0, \qquad 0\leqq r<a \tag{2}$$

$$R''+\frac{2}{r}R'-\left[\frac{m^2c^4-E^2}{\hbar^2c^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0, \qquad r>a \tag{3}$$

となる．（2）の解で $r=0$ で有限なものは

$$R_{\rm in}(r)=Aj_l\left(\frac{\sqrt{(E+V_0)^2-m^2c^4}}{\hbar c}r\right)$$

で与えられ，（3）の解で $r\to\infty$ で零になるのは

$$R_{\rm out}(r)=Bh_l^{(1)}\left(i\frac{\sqrt{m^2c^4-E^2}}{\hbar c}r\right)$$

で与えられる．（束縛状態を扱っているから $m^2c^4>E^2$ である．）連続性条件より A, B を消去して問題IV-6と同じように変形すると

$$\frac{\dfrac{\sqrt{(E+V_0)^2-m^2c^4}}{\hbar c}j_{l-1}\left(\dfrac{\sqrt{(E+V_0)^2-m^2c^4}}{\hbar c}a\right)}{j_l\left(\dfrac{\sqrt{(E+V_0)^2-m^2c^4}}{\hbar c}a\right)}$$

$$=\frac{i\frac{\sqrt{m^2c^4-E^2}}{\hbar c}h_{l-1}^{(1)}\left(i\frac{\sqrt{m^2c^4-E^2}}{\hbar c}a\right)}{h_l^{(1)}\left(i\frac{\sqrt{m^2c^4-E^2}}{\hbar c}a\right)} \tag{4}$$

を得る．Bessel 関数の性質を用いると（4）は $(E+V_0)^2>m^2c^4>E^2$ にのみ解を有することがわかる．これは深さ V_0 のポテンシャルによる束縛状態を扱っているのであるから当然予想されることである．

l 波に束縛状態ができるための V_0 の下限 v_0 は，束縛状態が $E=mc^2$ からできはじめることを考慮すると，（4）で $E=mc^2$ とおいて

$$j_{l-1}\left(\frac{\sqrt{v_0(v_0+2mc^2)}}{\hbar c}a\right)=0$$

の最小の正の解で与えられる．J_ν の最小の正の零点を $j_{\nu,1}$ と記すとこれは

$$\frac{\sqrt{v_0(v_0+2mc^2)}}{\hbar c}a=j_{l-\frac{1}{2},1}$$

となり，これを解くと

$$v_0a^2=\frac{\hbar^2}{m\left[1+\sqrt{1+\left(\frac{\hbar}{mca}j_{l-\frac{1}{2},1}\right)^2}\right]}\cdot(j_{l-\frac{1}{2},1})^2 \tag{5}$$

を得る。$l=0$ のときは $j_{-1}(z)=-n_0(z)=\cos z/z$ であるから $j_{-\frac{1}{2},1}=\pi/2$ となり，V_0 が

$$V_0a^2>\frac{\hbar^2}{m\left[1+\sqrt{1+\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^2\frac{\pi^2}{4}}\right]}\cdot\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \tag{6}$$

を満たせば $l=0$ の状態に少なくとも一個束縛状態が生じる．Bessel 関数の零点の性質より $j_{l-\frac{1}{2},1}$ は l と共に増大するから $l=0$ の状態に束縛状態が最もできやすく，したがって（6）が求める条件である．

〔**注意**〕 $(\hbar/mca)^2\ll 1$ のとき（5）は $v_0a^2\approx(\hbar^2/2m)(j_{l-\frac{1}{2},1})^2$ となり非相対論的 Schrödinger 方程式の結果（問題Ⅳ-**6**）と一致する．その理由は $(\hbar/mca)^2\ll 1$ より $\hbar^2/ma^2\ll mc^2$ が得られ $\hbar^2/ma^2$ は不確定性原理を用いると半径 a の球にとじこめられた状態の運動エネルギーの大きさの目安を与えこれが静止エネルギー mc^2 に比べて小さくなっているからである．

問題XIII-3 ［第3版］

aを極めて小さいとして $r<a$ に対しては $e\phi=-Ze^2/a$ で，$r>a$ に対しては $e\phi=-Ze^2/r$ であるようにポテンシャルエネルギー ϕ に対応するSchrödinger の相対論的波動方程式の $r=0$ で有限の解を求めよ．ただし，r についてのそれぞれのベキ級数の最初の2項だけをとればよいことに注意すること．なお $r>a$ に対する解は $a\to 0$ のとき (51.19) [42.19] の上の方の符号に対応する解に近づいてゆくことを証明せよ．

〔解〕 このポテンシャル・エネルギーに対して Schrödinger の相対論的方程式 (51.14) [42.14] は

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=\frac{(E+Ze^2/a)^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}R,\qquad 0\leqq r<a \tag{1}$$

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=\frac{(E+Ze^2/r)^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}R,\qquad r>a \tag{2}$$

となる．(1) の解で $r=0$ で有限なものは

$$R_{\text{in}}(r)=Aj_l\left(\frac{\sqrt{(E+Ze^2/a)^2-m^2c^4}}{\hbar c}r\right),\qquad 0\leqq r<a \tag{3}$$

で与えられる．また (2) の一般解は，方程式が (51.15) [42.15] と同じ形をしているから，その場合の議論を用いると

$$R_{\text{out}}(r)=Br^{s_+}f(r)+Cr^{s_-}g(r),\qquad r>a \tag{4}$$

で与えられることがわかる．ここに

$$s_\pm=-\tfrac{1}{2}\pm\tfrac{1}{2}[(2l+1)^2-4\gamma^2]^{\frac{1}{2}}$$

であり (4) の各項は (2) を満たし $f(0)=g(0)=1$ としている．$r=a$ における連続性条件 $R_{\text{in}}'(a)/R_{\text{in}}(a)=R_{\text{out}}'(a)/R_{\text{out}}(a)$ より

$$\frac{C}{B}=-\frac{a^{s_+}(R_{\text{in}}'(a)/R_{\text{in}}(a))\cdot f(a)-s_+a^{s_+-1}f(a)-a^{s_+}f'(a)}{a^{s_-}(R_{\text{in}}'(a)/R_{\text{in}}(a))\cdot g(a)-s_-a^{s_--1}g(a)-a^{s_-}g'(a)} \tag{5}$$

を得る．ここで $a\to 0$ の極限をとると (3) より

$$\lim_{a\to 0}a\times\frac{R_{\text{in}}'(a)}{R_{\text{in}}(a)}=\lim_{a\to 0}\frac{\sqrt{(Ea+Ze^2)^2-m^2c^4a^2}}{\hbar c}\cdot\frac{j_l'\left(\frac{\sqrt{(Ea+Ze^2)^2-m^2c^4a^2}}{\hbar c}\right)}{j_l\left(\frac{\sqrt{(Ea+Ze^2)^2-m^2c^4a^2}}{\hbar c}\right)}$$

$$=\gamma\times\frac{j_l'(\gamma)}{j_l(\gamma)}=l-\frac{\gamma j_{l+1}(\gamma)}{j_l(\gamma)}$$

に注意すると

$$\lim_{a\to 0}\frac{C}{B}=-\lim_{a\to 0}\frac{\left[\left(l-\dfrac{\gamma j_{l+1}(\gamma)}{j_l(\gamma)}\right)-s_+\right]a^{s_+-1}}{\left[\left(l-\dfrac{\gamma j_{l+1}(\gamma)}{j_l(\gamma)}\right)-s_-\right]a^{s_--1}}$$

$$=-\frac{l-\dfrac{\gamma j_{l+1}(\gamma)}{j_l(\gamma)}-s_+}{l-\dfrac{\gamma j_{l+1}(\gamma)}{j_l(\gamma)}-s_-}\cdot\lim_{a\to 0}a^{s_+-s_-} \qquad (6)$$

となる．$s_+-s_-=[(2l+1)^2-4\gamma^2]^{\frac{1}{2}}>0$ であるからこの極限は零である．したがって $a\to 0$ のとき（4）の右辺の第二項は零となり，第一項のみが生き残るから，これは (51.19) [42.19] の ＋ の符号に対応する解のみをとり出したことに対応している．

〔**注意**〕 この議論ではEを与えられたパラメーターとしている．Eに対する固有値方程式は（4）の解が $r\to\infty$ で零になるという条件より得られる C/B に対する方程式と（5）とを連立させることにより得られる．

また $\gamma^2\approx(Z/137)^2$ が1に比べて小さいとき

$$s_+\approx l-\frac{\gamma^2}{2l+1},\qquad s_-=-l-1+\frac{\gamma^2}{2l+1}$$

$$l-\frac{\gamma j_{l+1}(\gamma)}{j_l(\gamma)}\approx l-\frac{\gamma^2}{2l+3}$$

となるから（6）の右辺の係数は分子が γ^2 程度の大きさで分母が1の程度の大きさである．

問題XIII-4 〔第2版，XII-問5と同一〕

2行2列の行列であればどんなものでも $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ および1の一次結合として表わし得ることを証明せよ．この結果を用いて $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の各々と反可換であるような行列は存在しないことを示せ．

〔**解**〕 任意の2行2列の行列を

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

とする．これは

$$\begin{bmatrix}(a+d)/2+(a-d)/2 & (b+c)/2-i(c-b)/2i \\ (b+c)/2+i(c-b)/2i & (a+d)/2-(a-d)/2\end{bmatrix}$$

と書き直せ，これは

$$\frac{a+d}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}+\frac{b+c}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix}+\frac{c-b}{2i}\begin{bmatrix}0 & -i\\i & 0\end{bmatrix}+\frac{a-d}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}$$
$$=\frac{a+d}{2}\cdot 1+\frac{b+c}{2}\sigma_x+\frac{c-b}{2i}\sigma_y+\frac{a-d}{2}\sigma_z$$

に等しい．つまり任意の 2×2 行列は $1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の一次結合で（一意的に）書きあらわされたことになる．

いま $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の各々と反交換する 2×2 行列が存在するとしてそれを τ とすると上に示されたごとくこれは

$$\tau=c_0 1+c_1\sigma_x+c_2\sigma_y+c_3\sigma_z$$

と書ける．$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ はお互いに反交換すること（(52.11)［43.11]），および $\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=1$ を用いると

$$\tau\sigma_x+\sigma_x\tau=2c_0\sigma_x+2c_1\cdot 1=2\begin{bmatrix}c_1 & c_0\\c_0 & c_1\end{bmatrix},$$
$$\tau\sigma_y+\sigma_y\tau=2c_0\sigma_y+2c_2\cdot 1=2\begin{bmatrix}c_2 & -ic_0\\ic_0 & c_2\end{bmatrix},$$
$$\tau\sigma_z+\sigma_z\tau=2c_0\sigma_z+2c_3\cdot 1=2\begin{bmatrix}c_3+c_0 & 0\\0 & c_3-c_0\end{bmatrix}$$

となり，これらは仮定によりすべて零行列でなければならないから

$$c_0=c_1=c_2=c_3=0$$

を得る．すなわち零行列以外に $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ のすべてと反交換する行列は存在しないことになる．

〔**注意**〕 2×2 行列Aを

$$A=a_0\cdot 1+a_1\cdot\sigma_x+a_2\cdot\sigma_y+a_3\cdot\sigma_z$$

とあらわしたとき係数は

$$a_0=\tfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(A),\qquad a_1=\tfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(A\sigma_x),$$
$$a_2=\tfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(A\sigma_y),\qquad a_3=\tfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(A\sigma_z)$$

で与えられることがわかる．これを用いると問題の τ について

$$c_1=\tfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(\tau\sigma_x)=\tfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(\sigma_x\tau)=\tfrac{1}{4}\,\mathrm{tr}\,(\tau\sigma_x+\sigma_x\tau)=0$$

等より $c_1=c_2=c_3=0$ は直ちに出る．

問題XIII-5　［第２版，XII-問４と同一］

波動関数（52.17）［43.17］および（52.18）［43.18］は，スピン角運動量 $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'$ のどの成分の固有関数でもないことを具体的に示せ．

〔解〕 $\boldsymbol{\sigma}'$ は（52.19）［43.19］で与えられるごとく

$$\boldsymbol{\sigma}'=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix}$$

という形をしているから波動関数の第一，二成分と第三，四成分とに別々に作用する．故に $(u_1, u_2)^T$（Tは転置のこと）と $(u_3, u_4)^T$ とがそれぞれ $\boldsymbol{\sigma}$ のある一つの成分の固有状態になっており，それらの固有値が等しくなければならない．ところが $\boldsymbol{\sigma}$ の各成分は固有値 $+1$ と -1 とを持ち，各々は縮退していないから (u_1, u_2) と (u_3, u_4) とが比例しなければならないことになる．（52.17）［43.17］および（52.18）［43.18］の形より $p_x=p_y=0$ の場合にのみ (u_1, u_2) と (u_3, u_4) とが比例することがわかり，この場合には波動関数は $\frac{1}{2}\hbar\sigma_z'$ の固有状態になっている．一般には $p_x\neq0$，$p_y\neq0$ であるから $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'$ のいかなる成分の固有状態でもありえない．

〔注意〕 これらの波動関数はハミルトニアン（52.2）［43.2］の固有状態になっている．いまこのハミルトニアンと $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'$ との交換関係を求めると

$$H=c\begin{bmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}mc^2 & 0\\ 0 & -mc^2\end{bmatrix}$$

であるから（第２版では符号だけ異なる）

$$\begin{aligned}[H,\tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}']&=\tfrac{1}{2}\hbar\left\{c\begin{bmatrix}0 & (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\boldsymbol{\sigma}\\ (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\boldsymbol{\sigma} & 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}mc^2\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & -mc^2\boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix}\right.\\ &\qquad\left.-c\begin{bmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\\ \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}) & 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}mc^2\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & -mc^2\boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix}\right\}\\ &=\tfrac{1}{2}\hbar c\begin{bmatrix}0 & [(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}),\boldsymbol{\sigma}]\\ [(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}),\boldsymbol{\sigma}] & 0\end{bmatrix}=i\hbar c\begin{bmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{p}\\ \boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{p} & 0\end{bmatrix}\end{aligned}$$

$$=i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{p}$$

となる．したがってHの固有状態uが $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'$ のある成分，たとえばz成分，の固有状態にもなっているとするとuは

$$(\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{p})_z u=0$$

を満たさなければならない．ところが

$$(\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{p})_z(\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{p})_z=\begin{bmatrix}(\sigma_x p_y-\sigma_y p_x)^2 & 0\\ 0 & (\sigma_x p_y-\sigma_y p_x)^2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}p_x^2+p_y^2 & 0\\ 0 & p_x^2+p_y^2\end{bmatrix}$$

であるから上式に左から $(\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{p})_z$ を掛けると

$$(p_x^2+p_y^2)u=0$$

となり $p_x=p_y=0$ の場合を除いて $u=0$ となることがわかる．

問題XIII-6 〔第2版，XII-問6と同一〕

自由粒子の波動関数に対する確率の流れの密度 (52.20) [43.20] は，適当な極限をとれば対応する非相対論的な表式に一致することを示せ．

〔解〕 非相対論的極限では自由粒子の方程式 (52.3) [43.3] の正エネルギー解しかあらわれないと期待される．自由粒子に対する正エネルギーの一般解は

$$\psi(\mathbf{r},t)=\int(a(\mathbf{p})u_1(\mathbf{p})+b(\mathbf{p})u_2(\mathbf{p}))\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E_+t)\right\}d^3p$$

とあらわせる．ここに $E_+=+(c^2\mathbf{p}^2+m^2c^4)^{\frac{1}{2}}$ であり $u_1(\mathbf{p})$ と $u_2(\mathbf{p})$ はそれぞれ (52.17) [43.17] の上式と下式で与えられる四成分ベクトルである．そしてaとbとは重ね合わせの重み関数である．(52.17) より

$$u_1(\mathbf{p})=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \dfrac{c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})}{E_++mc^2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\1\\0\end{bmatrix}$$

$$u_2(\mathbf{p})=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \dfrac{c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})}{E_++mc^2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\\1\end{bmatrix}$$

とあらわされることがわかり*)，また

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \dfrac{c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}')}{E_+'+mc^2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \dfrac{c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})}{E_++mc^2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})}{E_++mc^2}\\ \dfrac{c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}')\boldsymbol{\sigma}}{E_+'+mc^2} & 0\end{bmatrix}$$

に注意すると（ただし $E_+'=(c^2\mathbf{p}'^2+m^2c^4)^{\frac{1}{2}}$）

$$cu_1(\mathbf{p}')^\dagger\boldsymbol{\alpha}u_1(\mathbf{p})=[1,0]\left[\frac{c^2}{E_+'+mc^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}')\boldsymbol{\sigma}+\frac{c^2}{E_++mc^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\right]\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},$$

$$cu_2(\mathbf{p}')^\dagger\boldsymbol{\alpha}u_1(\mathbf{p})=[0,1]\left[\frac{c^2}{E_+'+mc^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}')\boldsymbol{\sigma}+\frac{c^2}{E_++mc^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\right]\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},$$

$$cu_2(\mathbf{p}')^\dagger\boldsymbol{\alpha}u_2(\mathbf{p})=[0,1]\left[\frac{c^2}{E_+'+mc^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}')\boldsymbol{\sigma}+\frac{c^2}{E_++mc^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\right]\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

となり（1）より

$$\begin{aligned}\mathbf{S}(\mathbf{r},t)&=c\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\alpha}\psi(\mathbf{r},t)\\&=c\int(a(\mathbf{p}')^*u_1^\dagger(\mathbf{p}')+b(\mathbf{p}')^*u_2^\dagger(\mathbf{p}'))\exp\left\{\frac{-i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}-E_+'t)\right\}d^3p'\\&\quad\times\boldsymbol{\alpha}\times\int(a(\mathbf{p})u_1(\mathbf{p})+b(\mathbf{p})u_2(\mathbf{p}))\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E_+t)\right\}d^3p\\&=\iint[a(\mathbf{p}')^*,b(\mathbf{p}')^*]\left[\frac{c^2}{E_+'+mc^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}')\boldsymbol{\sigma}+\frac{c^2}{E_++mc^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\right]\begin{bmatrix}a(\mathbf{p})\\b(\mathbf{p})\end{bmatrix}\\&\quad\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}((\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}-(E_+-E_+')t)\right\}d^3p\,d^3p'\qquad(2)\end{aligned}$$

となる．ここで非相対対論的近似として

$$E_+\approx mc^2+\frac{\mathbf{p}^2}{2m},\qquad E_+'\approx mc^2+\frac{\mathbf{p}'^2}{2m},$$

$$\frac{c^2}{E_++mc^2}\approx\frac{1}{2m},\qquad\frac{c^2}{E_+'+mc^2}\approx\frac{1}{2m}$$

を採用すると（2）は近似的に

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2m}\iint[a(\mathbf{p}')^*,b(\mathbf{p}')^*]\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}')\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\right]\begin{bmatrix}a(\mathbf{p})\\b(\mathbf{p})\end{bmatrix}\\&\quad\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left((\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}-\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}-\frac{\mathbf{p}'^2}{2m}\right)t\right)\right\}d^3p\,d^3p'\qquad(3)\end{aligned}$$

に等しくなる．$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})=\mathbf{p}+i\mathbf{p}\times\boldsymbol{\sigma}$ に注意すると

---

*)　第2版ではハミルトニアンの定義が第3版のと符号だけ異なっており，したがって正エネルギー解の表式も異なってくるから上の証明法を少し変えねばならない．

$$[a(\mathbf{p}')^*, b(\mathbf{p}')^*]\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}')\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\right]\begin{bmatrix}a(\mathbf{p})\\b(\mathbf{p})\end{bmatrix}$$

$$=\left(\mathbf{p}'\begin{bmatrix}a(\mathbf{p}')\\b(\mathbf{p}')\end{bmatrix}\right)^\dagger\begin{bmatrix}a(\mathbf{p})\\b(\mathbf{p})\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}a(\mathbf{p}')\\b(\mathbf{p}')\end{bmatrix}^\dagger\mathbf{p}\begin{bmatrix}a(\mathbf{p})\\b(\mathbf{p})\end{bmatrix}+\left(i\mathbf{p}'\times\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix}a(\mathbf{p}')\\b(\mathbf{p}')\end{bmatrix}\right)^\dagger\begin{bmatrix}a(\mathbf{p})\\b(\mathbf{p})\end{bmatrix}$$

$$+\begin{bmatrix}a(\mathbf{p}')\\b(\mathbf{p}')\end{bmatrix}^\dagger i\mathbf{p}\times\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix}a(\mathbf{p})\\b(\mathbf{p})\end{bmatrix}$$

と変形される．ここで二成分波動関数

$$\psi_+(\mathbf{r},t)=\int\begin{bmatrix}a(\mathbf{p})\\b(\mathbf{p})\end{bmatrix}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\frac{\mathbf{p}^2}{2m}t\right)\right\}d^3p$$

を導入するとこれは明らかに非相対論的 Schrödinger 方程式の自由粒子の解となっておりこれを用いると（3）は

$$\frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi_+\right)^\dagger\psi_++\psi_+^\dagger\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi_+\right)+(\hbar\nabla\times\boldsymbol{\sigma}\psi_+)^\dagger\psi_++\psi_+^\dagger\hbar\nabla\times\boldsymbol{\sigma}\psi_+\right\}$$

となり

$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi_+\right)^\dagger=-\frac{\hbar}{i}(\nabla\psi_+)^\dagger,\qquad(\hbar\nabla\times\boldsymbol{\sigma}\psi_+)^\dagger=\hbar\nabla\times\psi_+^\dagger\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

に注意すると結局

$$\mathbf{S}(\mathbf{r},t)\approx\frac{\hbar}{2mi}(\psi_+^\dagger\nabla\psi_+-(\nabla\psi_+)^\dagger\psi_+)+\frac{\hbar}{2m}\nabla\times(\psi_+^\dagger\boldsymbol{\sigma}\psi_+)\tag{4}$$

となる．この右辺の第一項は非相対論的な流れ（7.3）［ 〃 ］に一致している．ただし ψ_+ は二成分でありこれは電子がスピンを持っていることからきている．また電子のスピンの影響は第二項にもあらわれておりこれはスピンに付随する流れと見なせる．したがってスピンの影響を無視すると第二項はなくなりしかも波動関数が一成分となり非相対論的な流れと完全に一致する．

問題XIII-7　［第2版，XII-問7と同一］

（52.11）［43.11］，（52.13）［43.13］および（52.19）［43.19］を利用して，（52.24）［43.24］を証明せよ．

〔**解**〕（52.13）［43.13］より

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{B})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{C})=\begin{bmatrix}0&(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B})\\(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B})&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C})\\(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C})&0\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}) & 0 \\ 0 & (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C})\end{bmatrix} \qquad (1)$$

となる．

$$\mathbf{B}=(B_x, B_y, B_z), \qquad \mathbf{C}=(C_x, C_y, C_z)$$

とおくと

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C})&=(\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z)(\sigma_x C_x+\sigma_y C_y+\sigma_z C_z)\\ &=\sigma_x{}^2 B_x C_x+\sigma_y{}^2 B_y C_y+\sigma_z{}^2 B_z C_z+\sigma_y\sigma_z B_y C_z+\sigma_z\sigma_y B_z C_y\\ &\quad+\sigma_z\sigma_x B_z C_x+\sigma_x\sigma_z B_x C_z+\sigma_x\sigma_y B_x C_y+\sigma_y\sigma_x B_y C_x\end{aligned}$$

となり（52.11）[43.11] および $\sigma_x{}^2=1$ 等を用いるとこの式は

$$(\mathbf{B}\cdot\mathbf{C})+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{C})$$

となる．したがって（1）は

$$\begin{bmatrix}(\mathbf{B}\cdot\mathbf{C}) & 0 \\ 0 & (\mathbf{B}\cdot\mathbf{C})\end{bmatrix}+i\begin{bmatrix}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{C}) & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{C})\end{bmatrix}$$

となり $\boldsymbol{\sigma}'$ の定義（52.19）[43.19] よりこれは

$$(\mathbf{B}\cdot\mathbf{C})+i\boldsymbol{\sigma}'\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{C})$$

と書ける．

問題XIII-8　［第2版，XII-問8と同一］

（53.9）［44.9］および（53.10）［44.10］で定義される演算子 α_r と k とは互いに交換可能であること，および $\hbar^2k^2$ が（53.12）［44.12］の右辺で与えられることを証明せよ．

〔解〕 $\hbar k$ の定義式（53.10）［44.10］

$$\hbar k=\beta(\boldsymbol{\sigma}'\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p})+\hbar)$$

に等式（52.24）［43.24］を $\mathbf{B}=\mathbf{r}, \mathbf{C}=\mathbf{p}$ として用いると

$$\hbar k=\beta(i(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})-i(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p})+\hbar)$$

となり（53.9）［44.9］の p_r, α_r の定義式を用いるとさらに

$$\hbar k=\beta(irp_r-ir\alpha_r(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}))$$

となる．この両辺に左から $ir^{-1}\alpha_r\beta$ を掛け $[r, \alpha_r]=0$, $\beta^2=\alpha_r{}^2=1$ を用いると

$$\alpha_r p_r+i\hbar r^{-1}\alpha_r\beta k=\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} \qquad (1)$$

を得る．$\hbar k, \alpha_r, (\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p})$ はエルミット作用素であることは容易にわかり，また

$$(p_r)^\dagger=((\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})+i\hbar)r^{-1}=((\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})-2i\hbar)r^{-1}$$
$$=r^{-1}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})+[(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}),r^{-1}]-r^{-1}\cdot 2i\hbar$$
$$=r^{-1}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})+i\hbar r^{-1}-r^{-1}2i\hbar=p_r$$

となるから p_r もエルミット作用素である．したがって（1）のエルミット共役をとると

$$p_r\alpha_r-i\hbar k\beta\alpha_r r^{-1}=\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} \qquad (2)$$

を得る．ところが

$$\alpha_r p_r-p_r\alpha_r=r^{-1}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r})r^{-1}((\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})-i\hbar)-r^{-1}((\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})-i\hbar)r^{-1}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r})$$
$$=r^{-1}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r})[r^{-1},(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})]+r^{-1}[(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r}),(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})]r^{-1}$$
$$=r^{-1}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r})(-i\hbar r^{-1})+r^{-1}(i\hbar(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r}))r^{-1}$$
$$=0$$

であるから（1）と（2）より

$$r^{-1}\alpha_r\beta k+k\beta\alpha_r r^{-1}=0 \qquad (3)$$

が得られる．$\boldsymbol{\sigma}'$ と β の形より k と β とは明らかに交換し，また $\mathbf{L}$ と r とも交換するから k と r^{-1} とは交換する．そして $\boldsymbol{\alpha}$ と β とは反交換するから α_r と β とは反交換する．ゆえに（3）は

$$-r^{-1}\beta(\alpha_r k-k\alpha_r)=0$$

となり両辺に左から βr を掛けると

$$\alpha_r k-k\alpha_r=0$$

を得る．

また

$$\hbar^2k^2=\beta(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L}+\hbar)\beta(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L}+\hbar)$$
$$=(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L}+\hbar)^2=(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L})^2+2\hbar(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L})+\hbar^2$$

であり (52.24) [43.24] で $\mathbf{B}=\mathbf{C}=\mathbf{L}$ とし角運動量の交換関係 $\mathbf{L}\times\mathbf{L}=i\hbar\mathbf{L}$ を用いると

$$\hbar^2k^2=\mathbf{L}^2+\hbar(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L})+\hbar^2$$
$$=(\mathbf{L}+\tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}')^2+\hbar^2-\tfrac{1}{4}\hbar^2\boldsymbol{\sigma}'^2$$

となり $\boldsymbol{\sigma}'^2=3$ に注意すると結局

$$\hbar^2 k^2 = (\mathbf{L} + \tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}')^2 + \tfrac{1}{4}\hbar^2$$

を得る.

問題XIII–9　〔第2版，XII–問9と同一〕

(52.27)［43.27］式における $\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}$ の項と，スピン–軌道エネルギーとの関連性を論ぜよ*).

〔**解**〕 方程式 (52.27)［43.27］は四成分で書かれているからこれを二成分二個で書くと $\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}$ の項は

$$\frac{ie\hbar}{2mc}\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \frac{ie\hbar}{2mc}\begin{pmatrix}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E})\psi_2\\ (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E})\psi_1\end{pmatrix} \tag{1}$$

となる．いま簡単のために方程式 (52.22)［43.22］で $\mathbf{A}=0$ の場合を考える．そして ϕ は静的で球対称であるとし

$$e\phi(r) = V(r)$$

とおくと電場 $\mathbf{E}$ は

$$e\mathbf{E} = -e\nabla\phi = -\frac{\mathbf{r}}{r}\frac{dV(r)}{dr}$$

で与えられるから (1) の上の二成分の項は

$$\frac{ie\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E})\psi_2 = -\frac{i\hbar}{2mc}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r})\psi_2 \tag{2}$$

となる．一方この場合 (ψ_1, ψ_2) に対する方程式は (53.5)［44.5］で与えられるから

$$\psi_2 = \frac{1}{(E'+2mc^2-V)}c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\psi_1 \approx \frac{1}{2mc^2}c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\psi_1$$

となり (2) は近似的に

$$-\frac{i\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\psi_1$$

となる．ここで

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}) = \mathbf{r}\cdot\mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p}) = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2i}{\hbar}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

を用いると

---

*)　第2版ではハミルトニアンの定義が第3版のと符号だけ異なっているから ψ_1 と ψ_2 との役割が入れ替わる．したがってそれに応じて上の議論を修正しなければならない．

これは

$$\left(-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\right)\psi_1$$

と書ける．したがって（2）の項はスピン一軌道エネルギーをその一部に含んでいる．

問題XIII-10　［第2版，XII-問10と同一］

(51.16) [42.16] や (53.26) [44.26] を導く際に現われてきてもよかった負の平方根は，実際に束縛状態に対応していないことを証明せよ．

〔**解**〕 Schrödinger の相対論的方程式の場合 (51.15) [42.15] の下段より

$$\frac{E^2\gamma^2}{\lambda^2}=m^2c^4-E^2$$

となりこれを解くと (51.16) [42.16] の他に

$$E=-mc^2\left[1+\frac{\gamma^2}{\lambda^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \qquad (1)$$

も出る．ところが束縛状態の波動関数の原点と無限遠点におけるふるまいより (51.17) [42.17]，つまり

$$\lambda=n'+s+1$$

が出る．そして s は (51.19) [42.19] の ＋ の符号をとるから $s>-\frac{1}{2}$ が成り立ち $n'\geqq 0$ より

$$\lambda>0 \qquad (2)$$

が導かれる．一方

$$\lambda=\frac{2E\gamma}{\hbar c\alpha}$$

であり $\gamma=Ze^2/\hbar c>0$ であるから（2）により $E>0$ でなければならない．つまり（1）は束縛状態に対応しない．

また Dirac 方程式の場合は

$$(m^2c^4-E^2)(s+n')^2=E^2\gamma^2$$

より (53.26) [44.26] の他に

$$E=-mc^2\left[1+\frac{\gamma^2}{(s+n')^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \qquad (3)$$

も解であるが波動関数の原点および無限遠点におけるふるまいより

$$s+n'=\frac{E\gamma}{\hbar c\alpha}$$

が導かれ $s=(k^2-\gamma^2)^{\frac{1}{2}}>0$, $n'\geqq 0$ より $E>0$ が導かれる．したがって（3）は束縛状態に対応しない．

Schrodinger の相対論的方程式の場合にはもっと“物理的”な説明ができる．引力のクーロン・ポテンシャル $e\phi=-Ze^2/r$ をもつ Schrodinger の相対論的方程式 (51.14) [42.14] を

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)-\gamma^2}{r^2}-\frac{2EZe^2}{\hbar^2c^2}\frac{1}{r}\right]R=\frac{E^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}R \qquad (4)$$

と書く．束縛状態であるためには勿論 $E^2-m^2c^4<0$ でなければならない．ここで上の方程式のかわりに

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)-\gamma^2}{r^2}\right]R=\frac{E^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}R \qquad (5)$$

を考える．この方程式の解で原点で $r^{s_+}(s_+=-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}[(2l+1)^2-4\gamma^2]^{\frac{1}{2}})$ のふるまいをするのは一意的に定まり

$$Aj_{s_+}\left(i\frac{\sqrt{m^2c^4-E^2}}{\hbar c}r\right) \qquad \left(\text{ただし}\quad j_{s_+}(z)=\sqrt{\frac{\pi}{2z}}J_{s_++\frac{1}{2}}(z)\right)$$

で与えられるがこの関数は $r\to\infty$ で指数的に増大する．つまり（5）は非相対論的 Schrodinger 方程式と見なしたとき，引力ポテンシャル γ^2/r^2 は束縛状態を作れない．ところが方程式（4）は方程式（5）にポテンシャル $-(2EZe^2/\hbar^2c^2)r^{-1}$ を加えたものでありもしEが負ならこの項は斥力として働くからさらに束縛状態が作れなくなるわけである．

問題XIII-11 ［第2版，XII-問12と同一］

Schrödinger および Dirac の相対論的波動方程式に従う粒子がクーロン場において，$n=2$, $n=3$ の両状態間に遷移を起こすものとする．選択則 $\Delta l=\pm 1$, $\Delta j=0$, ± 1 を用いて，許容される遷移の振動数を表にしてまとめよ．特に，Dirac の理論では７本の線が現われ，そのうち５本ははっきり分かれていることになるが，Schrödinger の理論ではそれよりずっと広くはなれている３本の線が現われることを示せ．

〔解〕 Schrödinger の相対論的理論の場合には $n=n'+l+1$ であるから $n=2$ と $n=3$ の状態は

$n=2$

n'	l	状態名
0	1	$2P$
1	0	$2S$

$n=3$

n'	l	状態名
0	2	$3D$
1	1	$3P$
2	0	$3S$

である．選択則 $\Delta l=\pm1$ を用いると許される遷移は

（1） $2P\leftrightarrow 3D$　（2） $2P\leftrightarrow 3S$　（3） $2S\leftrightarrow 3P$

の三つである．対応する振動数は (51.21) [42.21] より n, l で定まるエネルギー・レベルが

$$E_{(n,l)}=mc^2\left[1-\frac{\gamma^2}{2n^2}-\frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right]$$

で与えられるから

$$\omega_{(1)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,1)}-E_{(3,2)}|=\frac{mc^2}{\hbar}\left(\frac{5}{72}\gamma^2+\frac{801}{5}\times\frac{1}{10368}\gamma^4\right),$$

$$\omega_{(2)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,1)}-E_{(3,0)}|=\frac{mc^2}{\hbar}\left(\frac{5}{72}\gamma^2-147\times\frac{1}{10368}\gamma^4\right),$$

$$\omega_{(3)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,0)}-E_{(3,1)}|=\frac{mc^2}{\hbar}\left(\frac{5}{72}\gamma^2+973\times\frac{1}{10368}\gamma^4\right)$$

で与えられ，振動数のひらきは

$$\frac{mc^2}{\hbar}\cdot 1120\times\frac{1}{10368}\gamma^4 \tag{1}$$

である．

一方 Dirac 方程式の場合 $n=n'+|k|$, $k=l+1$($j=l+\frac{1}{2}$ の場合), $k=-l$($j=l-\frac{1}{2}$ の場合) であるから $n=2$ と $n=3$ の状態は

$n=2$

n'	k	l	j	状態名
0	2	1	$\frac{3}{2}$	$2P_{\frac{3}{2}}$
1	-1	1	$\frac{1}{2}$	$2P_{\frac{1}{2}}$
1	1	0	$\frac{1}{2}$	$2S_{\frac{1}{2}}$

$n=3$

n'	k	l	j	状態名
0	3	2	$\frac{5}{2}$	$3D_{\frac{5}{2}}$
1	-2	2	$\frac{3}{2}$	$3D_{\frac{3}{2}}$
1	2	1	$\frac{3}{2}$	$3P_{\frac{3}{2}}$
2	-1	1	$\frac{1}{2}$	$3P_{\frac{1}{2}}$
2	1	0	$\frac{1}{2}$	$3S_{\frac{1}{2}}$

である．（$n'=0$ のときは $k>0$ であることに注意.）選択則 $\Delta l=\pm1$, $\Delta j=0$, ±1 より許される遷移は

（1） $2P_{\frac{3}{2}}\leftrightarrow 3D_{\frac{5}{2}}$

（2） $2P_{\frac{3}{2}}\leftrightarrow 3D_{\frac{3}{2}}$

（3） $2P_{\frac{3}{2}}\leftrightarrow 3S_{\frac{1}{2}}$

（4） $2P_{\frac{1}{2}}\leftrightarrow 3D_{\frac{3}{2}}$

（5） $2P_{\frac{1}{2}}\leftrightarrow 3S_{\frac{1}{2}}$

（6） $2S_{\frac{1}{2}}\leftrightarrow 3P_{\frac{3}{2}}$

（7） $2S_{\frac{1}{2}}\leftrightarrow 3P_{\frac{1}{2}}$

の七つである．対応する振動数は（53.27）[44.27] より $n, |k|$ で定まるエネルギー・レベルが

$$E_{(n,|k|)}=mc^2\left[1-\frac{\gamma^2}{2n^2}-\frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{|k|}-\frac{3}{4}\right)\right]$$

で与えられるから

$$\omega_{(1)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,2)}-E_{(3,3)}|=\frac{mc^2}{\hbar}\left(\frac{5}{72}\gamma^2+65\times\frac{1}{10368}\gamma^4\right),$$

$$\omega_{(2)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,2)}-E_{(3,2)}|=\frac{mc^2}{\hbar}\left(\frac{5}{72}\gamma^2+33\times\frac{1}{10368}\gamma^4\right),$$

$$\omega_{(3)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,2)}-E_{(3,1)}|=\frac{mc^2}{\hbar}\left(\frac{5}{72}\gamma^2-63\times\frac{1}{10368}\gamma^4\right),$$

$$\omega_{(4)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,1)}-E_{(3,2)}|=\frac{mc^2}{\hbar}\left(\frac{5}{72}\gamma^2+357\times\frac{1}{10368}\gamma^4\right),$$

$$\omega_{(5)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,1)}-E_{(3,1)}|=\frac{mc^2}{\hbar}\left(\frac{5}{72}\gamma^2+261\times\frac{1}{10368}\gamma^4\right),$$

$$\omega_{(6)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,1)}-E_{(3,2)}|=\omega_{(4)},$$

$$\omega_{(7)}=\frac{1}{\hbar}|E_{(2,1)}-E_{(3,1)}|=\omega_{(5)}$$

となり，五個のみが異なっている．またそのひらきは

$$\frac{mc^2}{\hbar}\cdot 420\times\frac{1}{10368}\gamma^4$$

であるから（1）よりもかなり小さい．

問題XIII-12　［第２版，XII-問13と同一］

深さ V_0，半径 a の四角な井戸型の引力ポテンシャルに対する Dirac 方程式について $r=a$ での連続性条件を求めた上で，この方程式を解け．なお，a が与えられているとき，質量 m の粒子を丁度束縛するに足るような最小の V_0 を与える表式を求め，問題２［第２版，問３］の答と比較せよ．

〔**解**〕 球対称ポテンシャルであるから（53.17）[44.17]，つまり

$$\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{k}{\rho}\right)G-\left(\frac{\alpha_2}{\alpha}+\frac{V}{\hbar c\alpha}\right)F=0 \tag{1}$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}-\frac{k}{\rho}\right)F-\left(\frac{\alpha_1}{\alpha}-\frac{V}{\hbar c\alpha}\right)G=0 \tag{2}$$

がそのまま成り立つ．ここに $\alpha_1, \alpha_2, \rho, \alpha$ は（53.16）[44.16] で与えられており，$k=\pm1,\ \pm2, \cdots$ である。ポテンシャルは

$$V=\begin{cases}-V_0, & 0\leqq\rho<\alpha a\\ 0, & \rho>\alpha a\end{cases}$$

で与えられているから（１），（２）は具体的に，内部で

$$\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{k}{\rho}\right)G-\left(\frac{\alpha_2}{\alpha}-\frac{V_0}{\hbar c\alpha}\right)F=0, \qquad 0\leqq\rho<\alpha a \tag{3}$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}-\frac{k}{\rho}\right)F-\left(\frac{\alpha_1}{\alpha}+\frac{V_0}{\hbar c\alpha}\right)G=0, \qquad 0\leqq\rho<\alpha a \tag{4}$$

および外部で

$$\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{k}{\rho}\right)G-\frac{\alpha_2}{\alpha}F=0, \qquad \rho>\alpha a \tag{5}$$

$$\left(\frac{d}{d\rho}-\frac{k}{\rho}\right)F-\frac{\alpha_1}{\alpha}G=0, \qquad \rho>\alpha a \tag{6}$$

となる．これらは一階の連立微分方程式であるから，連続性条件としては $\rho=\alpha a$ で F および G の内部解と外部解とが連続であるという条件を課すのが自然である．

（５），（６）より G を消去すれば F に対する二階の微分方程式として

$$\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{k}{\rho}\right)\left(\frac{d}{d\rho}-\frac{k}{\rho}\right)F-\frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha^2}F=0, \qquad \rho>\alpha a$$

つまり

$$\frac{d^2}{d\rho^2}F-\left(1+\frac{k(k-1)}{\rho^2}\right)F=0, \qquad \rho>\alpha a \tag{7}$$

を得る．この解で $\rho\to\infty$ で零になるものは

$$F_{\rm out}(r)=(\alpha r)^{\frac{1}{2}}K_{|k-\frac{1}{2}|}(\alpha r), \qquad r>a \tag{8}$$

で与えられる．これを（6）に代入してGの外部解を求めると

$$G=\frac{\alpha}{\alpha_1}\left(\frac{d}{d\rho}-\frac{k}{\rho}\right)\rho^{\frac{1}{2}}K_{|k-\frac{1}{2}|}(\rho)$$

$$=\frac{\alpha}{\alpha_1}\rho^{\frac{1}{2}}\left[K'_{|k-\frac{1}{2}|}(\rho)-(k-\tfrac{1}{2})\frac{1}{\rho}K_{|k-\frac{1}{2}|}(\rho)\right]$$

となり，整数値nに対し

$$K_{n+\frac{1}{2}}(\rho)=K_{-n-\frac{1}{2}}(\rho) \qquad \text{（公式集，p. 172）}$$

が成り立つこと，および

$$\rho K'_\nu(\rho)-\nu K_\nu(\rho)=-\rho K_{\nu+1}(\rho) \qquad \text{（公式集，p. 174）}$$

を用いると結局

$$G_{\rm out}(r)=-\frac{\alpha}{\alpha_1}(\alpha r)^{\frac{1}{2}}K_{|k+\frac{1}{2}|}(\alpha r), \qquad r>a \tag{9}$$

を得る．

また内部解を求めるために（3），（4）よりGを消去してFに対する二階の微分方程式を求めると

$$\frac{d^2}{d\rho^2}F+\left[\frac{(E+V_0)^2-m^2c^4}{\alpha^2\hbar^2c^2}-\frac{k(k-1)}{\rho^2}\right]F=0$$

となり $\rho=0$ で有限な解として

$$F_{\rm in}(r)=A(\alpha r)^{\frac{1}{2}}J_{|k-\frac{1}{2}|}\left(\frac{1}{\hbar c}[(E+V_0)^2-m^2c^4]^{\frac{1}{2}}r\right),$$

$$0\leqq r<a \tag{10}$$

を得る．これを（4）に代入すると

$$\left(\frac{\alpha_1}{\alpha}+\frac{V_0}{\hbar c\alpha}\right)G=A\frac{\beta}{\alpha}\rho^{\frac{1}{2}}\left[J'_{|k-\frac{1}{2}|}\left(\frac{\beta}{\alpha}\rho\right)-(k-\tfrac{1}{2})\frac{\alpha}{\beta\rho}J_{|k-\frac{1}{2}|}\left(\frac{\beta}{\alpha}\rho\right)\right]$$

となる．ここで

$$\beta=\frac{[(E+V_0)^2-m^2c^4]^{\frac{1}{2}}}{\hbar c}$$

とおいた．Jに対する漸化式

$$J'_\nu(z)=\nu z^{-1}J_\nu(z)-J_{\nu+1}(z)$$
$$=J_{\nu-1}(z)-\nu z^{-1}J_\nu(z)\quad（公式集，p.159）$$

を用いると

$$G_{\mathrm{in}}(r)=A\times\frac{1}{\dfrac{\alpha_1}{\alpha}+\dfrac{V_0}{\hbar c\alpha}}\cdot\frac{\beta}{\alpha}(\alpha r)^{\frac{1}{2}}\times\begin{cases}-J_{k+\frac{1}{2}}(\beta r), & k-\frac{1}{2}>0\\ +J_{-k-\frac{1}{2}}(\beta r), & k-\frac{1}{2}<0\end{cases}\quad(11)$$

となる．連続性条件

$$F_{\mathrm{in}}(a)=F_{\mathrm{out}}(a)$$
$$G_{\mathrm{in}}(a)=G_{\mathrm{out}}(a)$$

よりAを消去すると $k=1,2,\cdots$ に対して

$$\frac{J_{k+\frac{1}{2}}(\beta a)}{J_{k-\frac{1}{2}}(\beta a)}=\frac{\alpha}{\alpha_1}\left(\frac{\alpha_1}{\alpha}+\frac{V_0}{\hbar c\alpha}\right)\cdot\frac{\alpha}{\beta}\cdot\frac{K_{k+\frac{1}{2}}(\alpha a)}{K_{k-\frac{1}{2}}(\alpha a)},\quad(k>0)\quad(12)$$

また $k=-1,-2,\cdots$ に対して

$$\frac{J_{-k-\frac{1}{2}}(\beta a)}{J_{-k+\frac{1}{2}}(\beta a)}=-\frac{\alpha}{\alpha_1}\left(\frac{\alpha_1}{\alpha}+\frac{V_0}{\hbar c\alpha}\right)\cdot\frac{\alpha}{\beta}\cdot\frac{K_{-k-\frac{1}{2}}(\alpha a)}{K_{-k+\frac{1}{2}}(\alpha a)},\quad(k<0)\quad(13)$$

となる．これがEに対する固有値方程式である．

Bessel 関数の性質を利用するとこれらの固有値方程式は

$$(E+V_0)^2>m^2c^4>E^2$$

でなければ解を持たないことがわかる．これは深さ V_0 の引力ポテンシャルによる束縛状態をあつかっているのであるから当然のことである．

束縛状態ができるための V_0 の下限を求めるためにはまず与えられた V_0 に対して束縛状態がもっともできやすい k の値を求める．F に対する二階の微分方程式を見ると $k(k-1)/\rho^2$ が斥力ポテンシャルとして働いているから $k=1$ のとき束縛状態ができやすいし，またGに対する二階の微分方程式を求めると $k(k+1)/\rho^2$ が斥力ポテンシャルとして働いているから $k=-1$ も候補となる．ところが束縛状態ができはじめるときはEが mc^2 よりわずかに小さいであろうから非相対論的近似が成り立ちそのとき $k=1$ は $l=0$ に対応し（$j=\frac{1}{2}$），$k=-1$ は $l=1$（$j=\frac{1}{2}$）に対応するから $k=1$ の方が束縛状態ができやすいであろう．

$k=1$ に対する固有値方程式は（12）より

$$\frac{J_{\frac{3}{2}}(\beta a)}{J_{\frac{1}{2}}(\beta a)}=\frac{\alpha}{\alpha_1}\left(\frac{\alpha_1}{\alpha}+\frac{V_0}{\hbar c\alpha}\right)\frac{\alpha}{\beta}\frac{K_{\frac{3}{2}}(\alpha a)}{K_{\frac{1}{2}}(\alpha a)}$$

となり $J_{\frac{1}{2}}(z)=(2/\pi z)^{\frac{1}{2}}\sin z$, $J_{\frac{3}{2}}(z)=(2/\pi z)^{\frac{1}{2}}(\sin z/z-\cos z)$ および $K_{\frac{1}{2}}(z)=(\pi/2z)^{\frac{1}{2}}e^{-z}$, $K_{\frac{3}{2}}(z)=(\pi/2z)^{\frac{1}{2}}\times(1+z^{-1})e^{-z}$ を用いて変形すると

$$1-\beta a\cot\beta a=\left(1+\frac{V_0}{\hbar c\alpha_1}\right)(1+\alpha a)$$

となる．束縛状態ができはじめるのは $E=mc^2$ からであるから，求める V_0 の下限 v_0 は上式で $E=mc^2$ とおいて

$$-\frac{\sqrt{v_0(v_0+2mc^2)}}{\hbar c}a\cot\frac{\sqrt{v_0(v_0+2mc^2)}}{\hbar c}a=\frac{v_0}{2mc^2}$$

なる方程式の最小の正の解で与えられる．

$$\frac{\sqrt{v_0(v_0+2mc^2)}}{\hbar c}a=x$$

とおくとこの方程式は

$$-x\cot x=\frac{1}{2}\left[\sqrt{1+\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^2x^2}-1\right]$$

となる． これは $\pi/2<x<\pi$ を満たす解を有するが $\hbar/mca$, つまり質量 m の粒子の Compton 波長のポテンシャルの半径に対する比が1に比べて小さいとき（問題XIII-2 の議論参照）$x=\pi/2$ 近くに解があるからそのまわりで展開して

$$x=\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{8}\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^2+0\left(\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^4\right)$$

を得る．これより

$$\begin{aligned}v_0&=mc^2\left[\sqrt{1+\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^2x^2}-1\right]\\&=mc^2\left\{\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^2-\left(\frac{\pi^2}{8}-1\right)\frac{\pi^2}{16}\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^4+0\left(\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^6\right)\right\}\end{aligned}\tag{14}$$

となる．Schrödinger の相対論的方程式の場合は問題XIII-2 の結果より $x=\pi/2$ が解であるから，同様の近似式として

$$v_0=mc^2\left\{\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^2-\frac{\pi^2}{8}\times\frac{\pi^2}{16}\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^4+0\left(\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^6\right)\right\}$$

が得られ（14）の方が大きいことがわかる．

$k=-1$ のときは（13）を用いると $E=mc^2$ のとき右辺が零となり $J_{\frac{1}{2}}(x)=0$ より $x=\pi$ を得る．したがって $k=1$ の場合よりも束縛状態ができにくい．

〔**注意**〕 (12) は一般の $k(>0)$ に対して $E=mc^2$ のとき

$$-\frac{xJ_{k-\frac{3}{2}}(x)}{(2k-1)J_{k-\frac{1}{2}}(x)}=\frac{1}{2}\left[\sqrt{1+\left(\frac{\hbar}{mca}\right)^2x^2}-1\right]$$

となり，これを満たす正の最小の x は $j_{k-\frac{3}{2},1}$ と $j_{k-\frac{1}{2},1}$ との間にあり (J_ν の正の最小の零点を $j_{\nu,1}$ と記している)，$\hbar/mca$ が1に比べて小さいとき $j_{k-\frac{3}{2},1}$ に近くなる．また (13) は一般の $k(<0)$ に対して $E=mc^2$ のとき右辺が零となるから $J_{-k-\frac{1}{2}}(x)=0$ となりこれを満たす正の最小の x は $j_{-k-\frac{1}{2},1}$ となる．Bessel 関数の零点の性質を用いると束縛状態のできやすさは $k=1,\ -1, 2, -2, \cdots$ の順であることがわかる．

第 XIV 章

波動場の量子化

問題XIV-1 ［第2版，XIII-問1と同一］

（54.12）［45.12］から（54.14）［45.14］までの関係を使って，ある場に対する古典論でのハミルトンの運動方程式は細胞近似ではラグランジ方程式と一致することを証明せよ．

〔解〕 ハミルトニアンHはラグランジアンLと（54.14）［45.14］，すなわち

$$H=\sum P_i\dot{\psi}_i-L$$

で結ばれている．Lはψと$\dot{\psi}$との汎関数であり（54.12）［45.12］を用いるとHはψとPとの汎関数であることがわかる．上式より

$$\frac{\delta H}{\delta P_i}=\dot{\psi}_i,\qquad \frac{\delta H}{\delta\psi_i}=-\frac{\delta L}{\delta\psi_i}$$

が導かれるから，これと（54.13）［45.13］より

$$\dot{\psi}_i=\frac{\delta H}{\delta P_i},\qquad \dot{P}_j=-\frac{\delta H}{\delta\psi_j} \tag{1}$$

が出る．一方（54.12）［45.12］より

$$P_i=\delta\tau_i\,\pi_i$$

が成り立つから（1）は

$$\dot{\psi}_i=\frac{\delta H}{\delta\tau_i\delta\pi_i},\qquad \dot{\pi}_i=-\frac{\partial H}{\delta\tau_i\delta\psi_i}$$

と書ける．これは細胞近似での（54.19）［45.19］に他ならない．

問題XIV-2 ［第2版，XIII-問2と同一］

（54.20）［45.20］式は，たとえ汎関数密度$\boldsymbol{F}$がψおよびπばかりでなく$\nabla\psi$や$\nabla\pi$を含む場合にもやはり成立することを証明せよ．

〔**解**〕 汎関数 F が汎関数密度 $\boldsymbol{F}$ により

$$F=\int \boldsymbol{F}(\psi, \nabla\psi, \pi, \nabla\pi, t)d^3\boldsymbol{r}$$

で与えられているとする．このとき

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+\int\left(\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial\psi}\dot{\psi}+\sum_{xyz}\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial(\partial\psi/\partial x)}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\dot{\psi}\right)d^3\boldsymbol{r}$$
$$+\int\left(\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial\pi}\dot{\pi}+\sum_{xyz}\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial(\partial\pi/\partial x)}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\dot{\pi}\right)d^3\boldsymbol{r}$$

となる．$\partial\dot{\psi}/\partial x$ と $\partial\dot{\pi}/\partial x$ の項を部分積分して，表面積分は零とすると，これは

$$\frac{\partial F}{\partial t}+\int\left(\left[\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial\psi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial(\partial\psi/\partial x)}\right)\right]\dot{\psi}\right.$$
$$\left.+\left[\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial\pi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial(\partial\pi/\partial x)}\right)\right]\dot{\pi}\right)d^3\boldsymbol{r}$$

に等しい．汎関数微分の定義により

$$\frac{\delta F}{\delta\psi}=\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial\psi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\ \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial(\partial\psi/\partial x)},$$

$$\frac{\delta F}{\delta\pi}=\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial\pi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\ \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial(\partial\pi/\partial x)}$$

であり（54.19）［45.19］を用いると上式は

$$\frac{\partial F}{\partial t}+\int\left(\frac{\delta F}{\delta\psi}\ \frac{\delta H}{\delta\pi}-\frac{\delta F}{\delta\pi}\ \frac{\delta H}{\delta\psi}\right)d^3\boldsymbol{r}$$

$$\equiv\frac{\partial F}{\partial t}+\{F, H\}$$

となり（54.20）［45.20］はそのまま成り立つ．

問題XIV-3　［第2版，XIII-問3と部分的に同じ］

波動場の振幅 $\psi(\mathbf{r}_0, t)$ はそれに対応する汎関数密度が $\psi(\mathbf{r}, t)\,\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ になっている一つの汎関数と見なすことができ，π に対しても同様なことが言える．これらの汎関数密度を使うと（54.20）［45.20］式は ψ および π に対する正しい運動方程式になっていることを証明せよ．

〔解〕

$$\psi(\mathbf{r}_0, t)=\int\psi(\mathbf{r}, t)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)d^3r,$$

$$\pi(\mathbf{r}_0, t)=\int\pi(\mathbf{r}, t)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)d^3r$$

と書くと汎関数微分の定義により

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{r}_0, t)}{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0), \qquad \frac{\partial\pi(\mathbf{r}_0, t)}{\partial\pi(\mathbf{r}, t)}=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$$

が得られる．したがって（54.20）［45.20］で $F=\psi(\mathbf{r}_0, t)$ または $\pi(\mathbf{r}_0, t)$ とおき，$\psi(\mathbf{r}_0, t)$ や $\pi(\mathbf{r}_0, t)$ の時間に対する依存性は運動方程式のみを通じてあらわれ陽には t に依らないことに注意すると

$$\dot{\psi}(\mathbf{r}_0, t)=\int\frac{\partial\psi(\mathbf{r}_0, t)}{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}\cdot\frac{\partial H}{\partial\pi}(\mathbf{r}, t)\,d^3r=\frac{\partial H}{\partial\pi}(\mathbf{r}_0, t),$$

$$\dot{\pi}(\mathbf{r}_0, t)=-\int\frac{\partial\pi(\mathbf{r}_0, t)}{\partial\pi(\mathbf{r}, t)}\cdot\frac{\partial H}{\partial\psi}(\mathbf{r}, t)\,d^3r=-\frac{\partial H}{\partial\psi}(\mathbf{r}_0, t)$$

となり，もとの運動方程式（54.19）［45.19］が得られる．

問題XIV-4 ［第２版，XIII-問６と同一］

（55.11）［46.11］およびそれにつづく方程式を u_k が関数の連続的な組をつくっている場合に拡張せよ．次に，第Ⅲ章の問題２［〃］を利用して，任意の点の無限小近傍で測定される粒子の個数はある正整数あるいは零になることを証明せよ．

〔解〕 連続パラメーター k をもつ正規完全直交系 $u_k(\mathbf{r})$：

$$\int u_k^*(\mathbf{r})u_k(\mathbf{r}')dk=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$
$$\int u_k^*(\mathbf{r})u_l(\mathbf{r})d^3r=\delta(k-l) \tag{1}$$

で $\psi(\mathbf{r}, t)$ を展開する．

$$\psi(\mathbf{r}, t)=\int a_k(t)u_k(\mathbf{r})dk, \quad \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)=\int a_k^\dagger(t)u_k^*(\mathbf{r})dk \tag{2}$$

とすると a_k, $a_k^\dagger$ は（１）より

$$a_k(t)=\int u_k^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t)d^3r, \quad a_k^\dagger(t)=\int u_k(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)d^3r$$

で与えられることがわかり，これらの交換関係は（55.6）[46.6] を用いて，

$$[a_k(t),\ a_l^{+}(t)]=\iint u_k^*(\mathbf{r})u_l(\mathbf{r}')[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]d^3rd^3r'$$

$$=\int u_k^*(\mathbf{r})u_l(\mathbf{r})d^3r=\delta(k-l), \qquad (3)$$

$$[a_k(t),\ a_l(t)]=0=[a_k^\dagger(t),\ a_l^\dagger(t)]$$

となる．そして

$$N=\int\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\ \psi(\mathbf{r},t)d^3r=\iiint a_k^\dagger(t)a_l(t)u_k^*(\mathbf{r})u_l(\mathbf{r})dkdld^3r$$

$$=\iint a_k^\dagger(t)\,a_l(t)\,\delta(k-l)dkdl=\int a_k^\dagger(t)a_k(t)dk$$

であるから

$$N_k(t)=a_k^\dagger(t)a_k(t) \qquad (4)$$

とおくと

$$N=\int N_k(t)dk \qquad (5)$$

とあらわされ，また $[N_k(t),\ N_l(t)]=0$ も容易に示せる．k が連続パラメーターの場合（2）が（55.11）[46.11] の，（3）が（55.12）[46.12] の，（4）と（5）が（55.13）[46.13] の一般化になっている．

特に連続パラメーターとして位置座標 $\mathbf{r}_0$ をとり

$$u_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$$

とおくと問題III-2 を三次元の場合にそのまま拡張するとこれらは正規完全直交系をなすことがわかる．（2）と同様に

$$\psi(\mathbf{r},t)=\int a_{\mathbf{r}_0}(t)u_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})d^3r_0,\ \psi^\dagger(\mathbf{r},t)=\int a_{\mathbf{r}_0}^\dagger(t)u_{\mathbf{r}_0}^*(\mathbf{r})d^3r_0$$

と展開すると $a_{\mathbf{r}_0}$, $a_{\mathbf{r}_0}^\dagger$ は

$$a_{\mathbf{r}_0}(t)=\int u_{\mathbf{r}_0}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t)d^3r=\psi(\mathbf{r}_0,t),$$

$$a_{\mathbf{r}_0}^\dagger(t)=\int u_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r},t)d^3r=\psi^\dagger(\mathbf{r}_0,t)$$

で与えられ，したがって（4）に対応する式は

$$N_{\mathbf{r}_0}(t)=\psi^\dagger(\mathbf{r}_0,t)\psi(\mathbf{r}_0,t)$$

となる．いま点 $\mathbf{r}_0$ の（無限小）近傍 Ω をとり

$$N(\Omega, t)=\int_{\Omega} N_{\mathbf{r}_0}(t)d^3r_0$$

とおくと $N(\Omega,t)$ は時刻 t において Ω 内にある粒子の数を測定する作用素になっていることを示そう．

まず真空状態 $|0\rangle$ に対しては $\psi(\mathbf{r},t)|0\rangle=0$ であるから

$$N(\Omega,t)|0\rangle=0$$

である．そして交換関係

$$[N(\Omega, t),\ \psi^{\dagger}(\mathbf{r}, t)]=\int_{\Omega} \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_0, t)[\psi(\mathbf{r}_0, t), \psi^{\dagger}(\mathbf{r}, t)]d^3r_0$$

$$=\begin{cases}\psi^{\dagger}(\mathbf{r},t) & (\mathbf{r}\text{ が }\Omega\text{ 内にある場合})\\ 0 & (\mathbf{r}\text{ が }\Omega\text{ 外にある場合})\end{cases}$$

を用いると状態 $\psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)|0\rangle$ に対して

$$N(\Omega,t)\psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)|0\rangle=[N(\Omega,t),\psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)]|0\rangle+\psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)N(\Omega,t)|0\rangle$$

$$=\begin{cases}1\times\psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)|0\rangle & (\mathbf{r}\text{ が }\Omega\text{ 内にある場合})\\ 0\times\psi^{\dagger}(\mathbf{r},t)|0\rangle & (\mathbf{r}\text{ が }\Omega\text{ 外にある場合})\end{cases}$$

となることがわかる．同様にして $\psi^{\dagger}(\mathbf{r}_1,t)\psi^{\dagger}(\mathbf{r}_2,t)\cdots\psi^{\dagger}(\mathbf{r}_n,t)|0\rangle$ は $N(\Omega,t)$ の固有状態でありその固有値は $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_n$ のうちで Ω 内にある個数に等しいことも示せる．したがって $N(\Omega,t)$ は Ω 内にある粒子の個数を数える演算子になっており $N_{\mathbf{r}_0}(t)$ は点 $\mathbf{r}_0$ にある粒子の密度を与えていると解釈される．

問題XIV-5 ［第3版］

H が (55.17) [46.23] の形をもつとき，(55.11) [46.11] で定義されている Heisenberg 流の見方での演算子 $a_k(t)$ の運動方程式を求めよ．また，この方程式を積分して $a_k(t)$ を $a_k(0)$ によって表わせ．

〔**解**〕 $a_k(t)$ に対する運動方程式は

$$i\hbar\frac{da_k(t)}{dt}=[a_k(t),\ H(t)] \qquad (1)$$

である．ハミルトニアン H は

$$H(t)=\sum_k a_k{}^{\dagger}(t)a_k(t)E_k$$

という形をしておりポテンシャル関数Vがtに依存していないときにはE_kは時間に依存せず，またHも運動の恒量となる．この場合運動方程式（1）は（55.12）[46.12]等を用いると

$$i\hbar\frac{da_k(t)}{dt}=[a_k(t),\ \sum_l a_l^\dagger(t)a_l(t)E_l]$$
$$=\sum_l [a_k(t), a_l^\dagger(t)]a_l(t)E_l=a_k(t)E_k$$

となり，これは容易に積分できて

$$a_k(t)=e^{-iE_kt/\hbar}a_k(0)$$

となる．

問題XIV-6　[第2版，XIII-問8と同一]

反交換子括弧は交換子括弧および Poisson 括弧とは異なった代数的性質をもつことを示せ．

〔解〕 交換子括弧 [,] と Poisson 括弧 { , } とは同じ代数的性質を持ち，それらは（24.27）[23.12] にまとめられている．すなわち

$$[A, B]=-[B, A],\quad \{A, B\}=-\{B, A\}, \quad \text{（反対称性）} \tag{1}$$

$$[A, c]=0,\quad （c\ \text{は}\ c\text{-数}）\quad \{A, c\}=0,\quad （c\ \text{は定数}） \tag{2}$$

$$[(A_1+A_2), B]=[A_1, B]+[A_2, B],\quad \{(A_1+A_2), B\}=\{A_1, B\}+\{A_2, B\}, \quad \text{（線型性）} \tag{3}$$

$$[A_1A_2, B]=[A_1, B]A_2+A_1[A_2, B],\quad \{A_1A_2, B\}=\{A_1, B\}A_2+A_1\{A_2, B\}, \quad \text{（分配律）} \tag{4}$$

$$[A, [B, C]]+[B, [C, A]]+[C, [A, B]]=0,\quad \{A, \{B, C\}\}+\{B, \{C, A\}\}+\{C, \{A, B\}\}=0, \quad \text{（Jacobi の恒等式）} \tag{5}$$

を満たす．（2），（4）を用いると本当の線型性

$$[(c_1A_1+c_2A_2), B]=c_1[A_1, B]+c_2[A_2, B],\quad （c_1, c_2\ \text{は}\ c\text{-数}）$$
$$\{(c_1A_1+c_2A_2), B\}=c_1\{A_1, B\}+c_2\{A_2, B\},\quad （c_1, c_2\ \text{は定数}） \tag{3'}$$

が導ける．

一方反交換子括弧 [,]$_+$ は（1）のかわりに対称性

$$[A, B]_+ = [B, A]_+$$

を満たすが（2），（4）に対応する性質はもっていない．しかし線型性

$$[(c_1A_1 + c_2A_2), B]_+ = c_1[A_1, B]_+ + c_2[A_2, B]_+$$

を満たす．そして Jacobi の恒等式に対応する性質ももっていない．

問題XIV-7 ［第2版，XIII-問10と同一］

非相対論的な Fermi-Dirac 粒子に対してはNは運動の恒量になることを証明せよ．

〔**解**〕 Fermi-Dirac 粒子に対する粒子数の作用素Nは Einstein-Bose 粒子の場合と同様に

$$N(t) = \int \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)d^3r$$

で定義される．ハミルトニアンも（55.5）[46.5] と同様に

$$H(t) = \int\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\cdot\nabla\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t)\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)\right)d^3r$$

で与えられているとする．ここにポテンシャル V は c- 数である．

$N(t)$ は運動方程式を通じてのみ t に依存するから $\partial N(t)/\partial t = 0$ であり，運動方程式として

$$i\hbar\frac{dN(t)}{dt} = [N(t),\ H(t)] \qquad (1)$$

を得る．

$$[\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t), H(t)] = $$
$$= \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)[\psi(\mathbf{r}, t), H(t)] + [\psi^\dagger(\mathbf{r}, t), H(t)]\psi(\mathbf{r}, t) \qquad (2)$$

であり $\psi, \psi^\dagger$ に対する運動方程式は Einstein-Bose 粒子の場合と同様に

$$i\hbar\frac{d\psi(\mathbf{r}, t)}{dt} = [\psi(\mathbf{r}, t), H(t)] = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t),$$

$$i\hbar\frac{d\psi^+(\mathbf{r}, t)}{dt} = [\psi^\dagger(\mathbf{r}, t), H(t)] = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) - V(\mathbf{r}, t)\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$$

となることは本文中に示されているからこれを（2）に代入すると

$$[\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t),\ H(t)]=\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t)+V(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\right)$$
$$+\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^\dagger(\mathbf{r},t)-V(\mathbf{r},t)\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\right)\psi(\mathbf{r},t)$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)-(\nabla\psi^\dagger(\mathbf{r},t))\psi(\mathbf{r},t)) \tag{3}$$

を得る．（3）を $\mathbf{r}$ について全空間で積分すると左辺は $[N(t), H(t)]$ となり右辺は零となる．したがって（1）より

$$\frac{dN(t)}{dt}=0$$

となるから N は運動の恒量である．

問題XIV-8　［第2版，XIII-問11と同一］

Fermi-Dirac 粒子の系で2個の状態が存在するものを考える．この系について（55.23）［46.29］および（55.24）［46.30］に類似の行列およびケットを具体的な形で求めよ．

〔解〕 第一の状態に粒子が n_1 個（$n_1=0$，または1），第二の状態に粒子が n_2 個（$n_2=0$，または1）存在する状態を $|n_1, n_2\rangle$ と記す．また第一（二）の状態に粒子を作る作用素を $a_1^\dagger(a_2^\dagger)$，消す作用素を $a_1(a_2)$ とする．（55.26）［46.32］より

$$\begin{aligned}
&a_1|0,0\rangle=0, && a_2|0,0\rangle=0,\\
&a_1|1,0\rangle=|0,0\rangle, && a_2|1,0\rangle=0,\\
&a_1|0,1\rangle=0, && a_2|0,1\rangle=|0,0\rangle,\\
&a_1|1,1\rangle=|0,1\rangle, && a_2|1,1\rangle=-|1,0\rangle,\\
&a_1^\dagger|0,0\rangle=|1,0\rangle, && a_2^\dagger|0,0\rangle=|0,1\rangle,\\
&a_1^\dagger|1,0\rangle=0, && a_2^\dagger|1,0\rangle=-|1,1\rangle,\\
&a_1^\dagger|0,1\rangle=|1,1\rangle, && a_2^\dagger|0,1\rangle=0,\\
&a_1^\dagger|1,1\rangle=0, && a_2^\dagger|1,1\rangle=0
\end{aligned}$$

となる．したがってケットを四次元ベクトルにより

$$|0,0\rangle\to\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad |1,0\rangle\to\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix},\quad |0,1\rangle\to\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix},\quad |1,1\rangle\to\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

と表現すると a_1 等は四行四列の行列により

$$a_1\to\begin{bmatrix}0&1&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&0&0\end{bmatrix},\qquad a_2\to\begin{bmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\0&0&0&0\\0&0&0&0\end{bmatrix},$$

$$a_1{}^\dagger\to\begin{bmatrix}0&0&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&1&0\end{bmatrix},\qquad a_2{}^\dagger\to\begin{bmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{bmatrix}$$

と表現される．

あるいは一般の状態を第一の状態と第二の状態との直積であらわし各々の状態では表現（55.24）［46.30］を採用して

$$|0,0\rangle\to\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\qquad |1,0\rangle\to\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},$$

$$|0,1\rangle\to\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix},\qquad |1,1\rangle\to\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

とすると，$a_1, a_1{}^\dagger$ は第一の状態に対しては（55.23）［46.29］と表現され，第二の状態に対しては恒等作用であるから

$$a_1\to\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix},\qquad a_1{}^\dagger\to\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}$$

と表現される．また $a_2, a_2{}^\dagger$ は第二の状態に対しては（55.23）［46.29］で表現され，第一の状態に対しては（55.26）［46.32］により $(-1)^{n_1}$ の作用をするから

$$a_2\to\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix},\qquad a_2{}^\dagger\to\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix}$$

と表現される．

なお後者の表現はベクトル $[u_1, u_2]^T\otimes[v_1, v_2]^T$（$T$は転置）を $[u_1v_1, u_2v_1, u_1v_2, u_2v_2]^T$ と同一視し，それにより行列

$$\begin{bmatrix}a_{11}&a_{12}\\a_{21}&a_{22}\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}b_{11}&b_{12}\\b_{21}&b_{22}\end{bmatrix}$$

を

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} b_{11} & \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} b_{12} \\ \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} b_{21} & \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} b_{22} \end{bmatrix}$$

と同一視すれば前者の表現に一致する.

〔**注意**〕 一般に k 個の状態が存在するときその具体的な表現は

$$|n_1, n_2, \cdots, n_k\rangle \to \begin{bmatrix} 1-n_1 \\ n_1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1-n_2 \\ n_2 \end{bmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{bmatrix} 1-n_k \\ n_k \end{bmatrix}$$

と対応づけると

$$a_l \to \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}}^{(l-1)\text{コ}} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}^{(k-l)\text{コ}},$$

$$a_l^\dagger \to \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}}^{(l-1)\text{コ}} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}^{(k-l)\text{コ}}$$

により得られる.

問題XIV-9 ［第2版，XIII-問15と部分的に同じ］

非相対論的な Schrödinger 方程式の二様の量子化のいずれに対しても $[\rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t)]=0$ になることを証明せよ. ただし, $\rho(\mathbf{r}, t)=e\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$.

〔**解**〕 $[\ ,\ ]_-$ で交換子括弧, $[\ ,\ ]_+$ で反交換子括弧をあらわすと

$$\begin{aligned} &[\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t), \psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)]_- \\ &\quad=\psi^\dagger(\mathbf{r},t)[\psi(\mathbf{r},t), \psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_\mp\psi(\mathbf{r}',t)-\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)[\psi(\mathbf{r}',t), \psi^\dagger(\mathbf{r},t)]_\mp\psi(\mathbf{r},t) \\ &\qquad\pm(\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r}',t)-\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r},t)) \end{aligned}$$

が成り立つ. したがって Einstein-Bose 粒子に対しては (55.6) [46.6] を, Fermi-Dirac 粒子に対しては (55.18) [46.24] を用いると, いずれの場合にも

$$\begin{aligned} [\rho(\mathbf{r},t), \rho(\mathbf{r}',t)] &= e^2[\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t), \psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)] \\ &= e^2\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')(\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r}',t)-\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r},t)) \\ &= e^2\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')(\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)-\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t))=0 \end{aligned}$$

が得られる.

問題XIV-10　[第2版，XIV-問1と同一]

$[\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]^2$ と $P_x(\mathbf{r}',t)$ との交換子括弧を計算し，その結果を使って真空中の電磁場における量 $\mathbf{P}$ に対する運動方程式が (56.6) [48.6] の第2式で与えられることを証明せよ.

〔解〕

$$[\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]^2=\left(\frac{\partial}{\partial y}A_z(\mathbf{r},t)-\frac{\partial}{\partial z}A_y(\mathbf{r},t)\right)^2+\left(\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t)-\frac{\partial}{\partial x}A_z(\mathbf{r},t)\right)^2$$
$$+\left(\frac{\partial}{\partial x}A_y(\mathbf{r},t)-\frac{\partial}{\partial y}A_x(\mathbf{r},t)\right)^2$$

のうち $P_x(\mathbf{r}',t)$ と交換しないのは，$\mathbf{A}$ と $\mathbf{P}$ との交換関係 (56.8) [48.8] より

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t)\right)^2-2\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t)\frac{\partial}{\partial x}A_z(\mathbf{r},t)$$
$$+\left(\frac{\partial}{\partial y}A_x(\mathbf{r},t)\right)^2-2\frac{\partial}{\partial x}A_y(\mathbf{r},t)\frac{\partial}{\partial y}A_x(\mathbf{r},t)$$

のみである．そして

$$\left[\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t),P_x(\mathbf{r}',t)\right]=i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t)\right)^2,\ P_x(\mathbf{r}',t)\right]=\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t)\left[\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t),\ P_x{}'(\mathbf{r}',t)\right]$$
$$+\left[\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t),P_x(\mathbf{r}',t)\right]\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t)=2i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t),$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial y}A_x(\mathbf{r},t),P_x(\mathbf{r}',t)\right]=i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial y}A_x(\mathbf{r},t)\right)^2,P_x(\mathbf{r}',t)\right]=2i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\frac{\partial}{\partial y}A_x(\mathbf{r},t)$$

であるから

$$[[\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]^2,P_x(\mathbf{r}',t)]=2i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\frac{\partial}{\partial z}A_x(\mathbf{r},t)$$
$$-2i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\frac{\partial}{\partial x}A_z(\mathbf{r},t)$$
$$+2i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\frac{\partial}{\partial y}A_x(\mathbf{r},t)-2i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\frac{\partial}{\partial x}A_y(\mathbf{r},t)$$
$$=2i\hbar\nabla\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\nabla A_x(\mathbf{r},t)-2i\hbar\nabla\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\frac{\partial}{\partial x}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\qquad(1)$$

を得る．

また P_x に対する運動方程式は，ハミルトニアンが（56.7）[48.7] で与えられているから

$$i\hbar \dot{P}_x(\mathbf{r}', t) = [P_x(\mathbf{r}', t), H] = \frac{1}{8\pi}\int [P_x(\mathbf{r}', t), (\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2]\, d^3r$$

となり（1）を用いると右辺は

$$-\frac{1}{8\pi}\int\left(2i\hbar\nabla\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\nabla A_x(\mathbf{r}, t) - 2i\hbar\nabla\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\frac{\partial}{\partial x}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\right)d^3r$$

$$= \frac{i\hbar}{4\pi}\left(\nabla'^2 A_x(\mathbf{r}', t) - \frac{\partial}{\partial x'}\nabla'\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}', t)\right)$$

となる．一方

$$(\nabla\times\nabla\times\mathbf{A})_x = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial}{\partial x}A_y - \frac{\partial}{\partial y}A_x\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial}{\partial z}A_x - \frac{\partial}{\partial x}A_z\right)$$

$$= -\nabla^2 A_x + \frac{\partial}{\partial x}\nabla\cdot\mathbf{A}$$

であるから上に得られた運動方程式は

$$\dot{P}_x(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{4\pi}(\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))_x$$

と書け，これは（56.6）[48.6] の第二式と一致する．

問題XIV-11　［第2版，XIV-問**2**と同一］

もしも **A** および **P** の二つの直交成分の間の交換子括弧が

$$[A_s(\mathbf{r}, t), P_{s'}(\mathbf{r}', t)] = i\hbar\delta_{ss'}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \frac{i\hbar}{4\pi}\frac{\partial}{\partial r_s}\frac{\partial}{\partial r'_{s'}}\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)$$

で与えられるとすれば，この場合異なった空間点での **A** および $\nabla\cdot\mathbf{P}$ はお互いに可換であることを証明せよ．

〔**解**〕問題に与えられた A_s と $P_{s'}$ との交換関係の両辺を $r'_{s'}$ で微分して s' について加えると

$$[A_s(\mathbf{r}, t), \nabla'\cdot\mathbf{P}(\mathbf{r}', t)] = i\hbar\frac{\partial}{\partial r'_s}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \frac{i\hbar}{4\pi}\frac{\partial}{\partial r_s}\nabla'^2\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right) \quad (1)$$

を得る．ところが

$$\frac{\partial}{\partial r'_s}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=-\frac{\partial}{\partial r_s}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

$$\nabla'^2\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)=-4\pi\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

であるから（1）の右辺は恒等的に零となる．したがって勿論 $\mathbf{r}\neq\mathbf{r}'$ でも零である．

問題XIV-12　［第2版，XIV-問3と同一］

（56.8）［48.8］の交換関係の最後のものを問題11［第2版，XIV-問2］の関係で置き換えても場の強さに関係しているような交換関係には影響しないことを示せ．

〔**解**〕 場の強さ **E**, **H** は **P**, **A** により

$$\mathbf{E}=-4\pi c\mathbf{P},\qquad \mathbf{H}=\nabla\times\mathbf{A}$$

で与えられる．**E** の各成分はお互いに可換であり **H** の各成分もお互いに可換であることには変わりはない．

$$\mathrm{E}_l(\mathbf{r}',t)=-4\pi cP_l(\mathbf{r}',t)$$

と

$$\mathrm{H}_i(\mathbf{r},t)=\sum_{j,k}\epsilon_{ijk}\frac{\partial}{\partial r_j}A_k(\mathbf{r},t)$$

（ただし ϵ_{ijk} は完全反対称テンソルで $\epsilon_{123}=1$）

との交換関係は，**A** と **P** との交換関係として問題XIV-11［第2版，XIV-問2］に与えられている交換関係を採用すると

$$\begin{aligned}[\mathrm{H}_i(\mathbf{r},t),\mathrm{E}_l(\mathbf{r}',t)]&=-4\pi c\sum_{j,k}\epsilon_{ijk}\frac{\partial}{\partial r_j}[A_k(\mathbf{r},t),P_l(\mathbf{r}',t)]\\&=-4\pi c\sum_{j,k}\epsilon_{ijk}\frac{\partial}{\partial r_j}\left\{i\hbar\,\delta_{kl}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-\frac{i\hbar}{4\pi}\frac{\partial}{\partial r_k}\frac{\partial}{\partial r'_l}\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\right\}\\&=-4\pi i\hbar c\sum_j\epsilon_{ijl}\frac{\partial}{\partial r_j}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')+i\hbar c\sum_{j,k}\epsilon_{ijk}\frac{\partial}{\partial r_j}\frac{\partial}{\partial r_k}\frac{\partial}{\partial r'_l}\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\end{aligned}$$

となり，（56.8）［48.8］の交換関係を修正した影響は第二項にあらわれている．ところがこの第二項は，ϵ_{ijk} が j と k について反対称であり $(\partial/\partial r_j)(\partial/\partial r_k)$ が j と k について対称であるから j と k について和をとると零になる．したがって場の強さの交換関係に関してはこの修正は影響しない．

問題XIV-13　［第2版，XIV-問4と同一］

$\nabla\cdot\mathbf{H}$ は電磁場のハミルトニアン（56.15）［48.15］と可換であり，したがって運動の恒量になっていることを証明せよ．

〔解〕 $\mathbf{H}$ の各成分は（56.11）［48.11］により交換するから $\nabla\cdot\mathbf{H}$ と $\mathbf{H}^2$ も交換する．前問の結果を用いると

$$[\mathrm{H}_i(\mathbf{r},t),\mathrm{E}_l(\mathbf{r}',t)]=-4\pi i\hbar c\sum_j\epsilon_{ijl}\frac{\partial}{\partial r_j}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

であるから，この式を r_i で微分して i について和をとると

$$[\nabla\cdot\mathbf{H}(\mathbf{r},t),\mathrm{E}_l(\mathbf{r}',t)]=-4\pi i\hbar c\sum_{i,j}\epsilon_{ijl}\frac{\partial}{\partial r_i}\frac{\partial}{\partial r_j}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

となり右辺は明らかに零である．したがって $\nabla\cdot\mathbf{H}$ と $\mathbf{E}^2$ も交換する．電磁場のハミルトニアンは（56.15）［48.15］より

$$H=\frac{1}{8\pi}\int(\mathbf{E}^2+\mathbf{H}^2)d^3r$$

で与えられているから $\nabla\cdot\mathbf{H}$ は H と交換し，運動の恒量となる．

問題XIV-14　［第2版，XIV-問5と同一］

（56.16）［48.16］の各段階の計算を実行し，Maxwell 方程式の最初の二つの方程式が得られていることを示せ．

〔解〕 問題XIV-12［第2版，XIV-問3］の結果を E_x と $\mathbf{H}$ との交換関係について具体的に書くと

$$[\mathrm{E}_x(\mathbf{r},t),\ \mathrm{H}_x(\mathbf{r}',t)]=0,$$

$$[\mathrm{E}_x(\mathbf{r},t),\ \mathrm{H}_y(\mathbf{r}',t)]=4\pi i\hbar c\frac{\partial}{\partial z'}\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r}),$$

$$[\mathrm{E}_x(\mathbf{r},t),\ \mathrm{H}_z(\mathbf{r}',t)]=-4\pi i\hbar c\frac{\partial}{\partial y'}\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$$

となる．これより

$$\begin{aligned}[\mathrm{E}_x(\mathbf{r},t),\ \mathbf{H}^2(\mathbf{r}',t)]&=2[\mathrm{E}_x(\mathbf{r},t),\ \mathrm{H}_y(\mathbf{r}',t)]\mathrm{H}_y(\mathbf{r}',t)\\&\quad+2[\mathrm{E}_x(\mathbf{r},t),\ \mathrm{H}_z(\mathbf{r}',t)]\mathrm{H}_z(\mathbf{r}',t)\\&=8\pi i\hbar c\left\{\frac{\partial}{\partial z'}\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\mathrm{H}_y(\mathbf{r}',t)-\frac{\partial}{\partial y'}\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\mathrm{H}_z(\mathbf{r}',t)\right\}\end{aligned}$$

を得る．E_x と $\mathbf{E}$ とは交換するから

$$i\hbar\dot{\mathrm{E}}_x(\mathbf{r},t)=[\mathrm{E}_x(\mathbf{r},t),H]=\frac{1}{8\pi}\int[\mathrm{E}_x(\mathbf{r},t),(\mathbf{E}^2(\mathbf{r}',t)+\mathbf{H}^2(\mathbf{r}',t))]d^3r'$$

$$=i\hbar c\int\left\{\frac{\partial}{\partial z'}\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\mathrm{H}_y(\mathbf{r}',t)-\frac{\partial}{\partial y'}\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\mathrm{H}_z(\mathbf{r}',t)\right\}d^3r'$$

$$=i\hbar c\left\{\frac{\partial}{\partial y}\mathrm{H}_z(\mathbf{r},t)-\frac{\partial}{\partial z}\mathrm{H}_y(\mathbf{r},t)\right\}=i\hbar c(\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t))_x \qquad (1)$$

を得る．また H_x と $\mathbf{E}$ との交換関係

$$[\mathrm{H}_x(\mathbf{r},t),\mathrm{E}_x(\mathbf{r}',t)]=0,$$

$$[\mathrm{H}_x(\mathbf{r},t),\ \mathrm{E}_y(\mathbf{r}',t)]=4\pi i\hbar c\frac{\partial}{\partial z}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

$$[\mathrm{H}_x(\mathbf{r},t),\ \mathrm{E}_z(\mathbf{r}',t)]=-4\pi i\hbar c\frac{\partial}{\partial y}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

より

$$[\mathrm{H}_x(\mathbf{r},t),\mathbf{E}^2(\mathbf{r}',t)]=8\pi i\hbar c\left\{\frac{\partial}{\partial z}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathrm{E}_y(\mathbf{r}',t)-\frac{\partial}{\partial y}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathrm{E}_z(\mathbf{r}',t)\right\}$$

となりまた H_x と $\mathbf{H}$ とは交換するから

$$i\hbar\dot{\mathrm{H}}_x(\mathbf{r},t)=[\mathrm{H}_x(\mathbf{r},t),H]$$

$$=i\hbar c\int\left\{\frac{\partial}{\partial z}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathrm{E}_y(\mathbf{r}',t)-\frac{\partial}{\partial y}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathrm{E}_z(\mathbf{r}',t)\right\}d^3r'$$

$$=-i\hbar c(\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r},t))_x \qquad (2)$$

を得る．（1）および（2）を他の成分についても求めると

$$\dot{\mathbf{E}}=c\nabla\times\mathbf{H},\qquad \dot{\mathbf{H}}=-c\nabla\times\mathbf{E}$$

となり，これは Maxwell 方程式（56.1）［48.1］の最初の二つに他ならない．

問題XIV-15　［第2版，XIV-問6と同一］

（56.18）［48.18］の括弧式のそれぞれと（56.22）［48.22］のハミルトニアンとの間の交換子括弧を計算し，それぞれの括弧式が時間について一定になっていることを示せ．この結果は，これらの交換法則が運動方程式と両立しうるものであることを意味している．

〔**解**〕 ある時刻 t で交換関係

$$[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)]=[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]=i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}, \quad (1)$$

他の交換子括孤はすべて零　(2)

が成り立っているとする．このときハミルトニアン（56.22）[48.22] より時刻 t において（56.24）[48.24]，すなわち

$$\begin{aligned}
&[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), H(t)]=4\pi i\hbar c^2 p_{\mathbf{k}\lambda}(t),\\
&[p_{\mathbf{k}\lambda}(t), H(t)]=-\frac{i\hbar k^2}{4\pi}q_{\mathbf{k}\lambda}(t),\\
&[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), H(t)]=4\pi i\hbar c^2 p_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t),\\
&i\hbar\dot{p}_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t)=[p_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), H(t)]=-\frac{i\hbar k^2}{4\pi}q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t)
\end{aligned} \quad (3)$$

が成り立つ．

いま $[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)]$ と $H(t)$ との交換子括孤を計算をするために Jacobi の恒等式を用いて

$$\begin{aligned}
[[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)], H(t)]=&[[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), H(t)], p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)]\\
&+[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), [p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t), H(t)]]
\end{aligned} \quad (4)$$

と変形しておく．ここで（3）を用いるとこれは

$$4\pi i\hbar c^2[p_{\mathbf{k}\lambda}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)]-\frac{i\hbar k'^2}{4\pi}[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), q_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)]$$

となり時刻 t での交換関係（2）より零となる．同様に

$$\begin{aligned}
[[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)], H(t)]=&[[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), H(t)], p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]\\
&+[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), [p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t), H(t)]] \quad (5)\\
=&4\pi i\hbar c^2[p_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]-\frac{i\hbar k'^2}{4\pi}[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), q_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]=0
\end{aligned}$$

を得る．

つまり時刻 t での運動方程式を導くには（1）と（2）が必要であり，運動方程式を導いてしまえば

$$\frac{d}{dt}[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)]=[\dot{q}_{\mathbf{k}\lambda}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)]+[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), \dot{p}_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}(t)] \quad (4)'$$

および

$$\frac{d}{dt}[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]=[\dot{q}_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]+[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}(t), \dot{p}_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)] \quad (5)'$$

が零であることは運動方程式と交換関係を用いて導ける．このことは交換関係と運動方程式が両立することを意味している．

問題XIV-16　［第2版，XIV-問8と同一］

$\mathsf{E}_x(\mathbf{r},t)$ と $\mathsf{H}_y(\mathbf{r}',t')$ との交換子括弧に対する（56.43）［48.43］の表式を導け．

〔**解**〕（56.42）［48.42］で $s=x,\ s'=y$ とおきその下の等式を用いると

$$[\mathsf{E}_x(\mathbf{r},t),\mathsf{H}_y(\mathbf{r}',t')]=L^{-3}\sum_{\mathbf{k}}4\pi i\hbar ck\frac{k_z}{k}\sin(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-kc(t-t')) \quad (1)$$

を得る．ここで等式

$$\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial t'}\sin(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-kc(t-t'))=-ckk_z\sin(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-kc(t-t'))$$

を用いると（1）の右辺は

$$-4\pi i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial t'}L^{-3}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{k}\sin(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-kc(t-t'))$$

となる．ところが（56.39）［48.39］の一つ上の式により

$$L^{-3}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{k}\sin(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-kc(t-t'))\xrightarrow[L\to\infty]{}D(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t')$$

と定義されているから（1）式は $L\to\infty$ で

$$[\mathsf{E}_x(\mathbf{r},t),\mathsf{H}_y(\mathbf{r}',t')]=-4\pi i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial t'}D(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t')$$

となり（56.43）［48.43］が導かれる．

問題XIV-17　［第2版，XIV-問9に類似］

（57.3）式から，$\psi,\ \psi^*,\ \mathbf{A}$ および ϕ に対するラグランジの運動方程式を求めよ．

〔**解**〕ラグランジアン密度は（57.3）により

$$L=\psi^*\left(i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}-e\phi\psi\right)-\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^*\right]\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]$$
$$-V\psi^*\psi+\frac{1}{8\pi}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right)^2-\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2$$

で与えられている．

まず ψ に対する運動方程式を求めるために ψ^* について汎関数微分を行なう．(54.9)［45.9］を参照して

$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \psi^*}=\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \psi^*}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial \psi^*/\partial x)}\right)$$

はこの場合

$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \psi^*}=i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}-e\phi\psi-\frac{1}{2m}\left(-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]-V\psi,$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial \psi^*/\partial x)}=-\frac{i\hbar}{2m}\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)_x\psi\right]$$

であるから

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \psi^*}&=i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}-e\phi\psi+\frac{1}{2m}\frac{e}{c}\mathbf{A}\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]-V\psi\\&\quad+\frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]\\&=\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\phi\right)\psi-\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi-V\psi\end{aligned}$$

となる．そして $\partial L/\partial\dot{\psi}^*=\partial \boldsymbol{L}/\partial\dot{\psi}^*$ ((54.10)［45.10］参照）はこの場合零であるからラグランジの運動方程式は（54.11）［45.11］より

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\phi\right)\psi=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi+V\psi \qquad (1)$$

となる．

次に ψ で変分を行なうと

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \psi}&=\psi^*(-e\phi)-\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^*\right]\cdot\left(-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)-V\psi^*\\&\quad-\nabla\cdot\left(-\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^*\right]\right)(-i\hbar)\\&=-e\phi\psi^*-\frac{1}{2m}\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi^*-V\psi^*,\end{aligned}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}=i\hbar\psi^*$$

となるから ψ^* に対するラグランジの運動方程式として

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\phi\right)\psi^*=\frac{1}{2m}\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi^*+V\psi^* \qquad (2)$$

を得る．

また A_x について変分すると

$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial A_x}=-\frac{1}{2m}\left(-\frac{e}{c}\psi^*\right)\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)_x\psi\right]-\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)_x\psi^*\right]\left(-\frac{e}{c}\psi\right)$$
$$=\left\{\frac{e\hbar}{2\,imc}(\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi)-\frac{e^2}{mc^2}\mathbf{A}\psi^*\psi\right\}_x$$

であり，また

$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial A_x/\partial x)}=0,$$
$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial A_x/\partial y)}=\frac{1}{4\pi}\left(\frac{\partial}{\partial x}A_y-\frac{\partial}{\partial y}A_x\right),$$
$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial A_x/\partial z)}=-\frac{1}{4\pi}\left(\frac{\partial}{\partial z}A_x-\frac{\partial}{\partial x}A_z\right)$$

より

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial A_x/\partial x)}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial A_x/\partial y)}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial A_x/\partial z)}\right)=\frac{1}{4\pi}(\nabla\times\nabla\times\mathbf{A})_x,$$

そして

$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial A_x}=\frac{1}{4\pi}\,\frac{1}{c}\left(\frac{1}{c}\,\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right)_x$$

を得るから，ラグランジの運動方程式は

$$(\nabla\times\nabla\times\mathbf{A})_x-\frac{1}{c}\,\frac{\partial}{\partial t}\left(-\frac{1}{c}\,\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\phi\right)_x$$
$$=\frac{4\pi}{c}\left\{\frac{e\hbar}{2im}(\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi)-\frac{e^2}{mc}\mathbf{A}\psi^*\psi\right\}_x$$

となる．他の成分についても変分を行ない（56.2）[48.2] および $\mathbf{J}$ の定義（57.2）を用いると

$$\nabla\times\mathbf{H}-\frac{1}{c}\,\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{E}=\frac{4\pi}{c}\mathbf{J} \qquad (3)$$

を得る．

最後に ϕ について変分を行なうと

$$\frac{\partial L}{\partial \phi}=-e\psi^*\psi,$$

$$\frac{\partial L}{\partial(\partial\phi/\partial x)}=\frac{1}{4\pi}\left(\frac{1}{c}\ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right)_x,$$

$$\frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}}=0$$

より運動方程式として

$$\nabla\cdot\left(-\frac{1}{c}\ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\phi\right)=4\pi e\psi^*\psi$$

を得，これは（56.2）[48.2] および ρ の定義（57.2）[49.3] を用いると

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=4\pi\rho \qquad (4)$$

となる．

ここに得られた方程式（1），（2）は（44.1）[35.1] およびその複素共役に一致し（3），（4）は（44.2）[35.2] の第二，第三式に一致している．

問題XIV-18　［第2版，XIV-問10に類似］

ハミルトニアンが（57.11）を（57.12）で置き換えたときの（57.10）で与えられているとして，ψ に対する量子論的な運動方程式を求めよ．ϕ を $e\int|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)d^3r'$ で置き換えた場合にはこの方程式は（44.1）と一致することを証明せよ．もしも上のような置き換えが行なわれないとすれば，どのような結果が得られるか？．

〔解〕 ハミルトニアンは

$$H=\int\left\{\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^\dagger\right]\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]+V\psi^\dagger\psi\right\}d^3r$$
$$+\int\left[2\pi c^2\mathbf{P}_1{}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2\right]d^3r$$
$$+\frac{e^2}{2}\iint\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r},t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3rd^3r' \qquad (1)$$

で与えられる．ψ に対する運動方程式はこのハミルトニアンにより

$$i\hbar\dot{\psi}=[\psi,H] \qquad (2)$$

で与えられるが，この右辺を求めるために予備的な計算を行なう．

[,]₋ で交換子括孤，[,]₊ で反交換子括孤をあらわすものとすると

$$[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}'',t)]_-=[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_\mp\psi(\mathbf{r}'',t)$$
$$\pm\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)[\psi(\mathbf{r},t),\psi(\mathbf{r}'',t)]_\mp$$

が成り立つから ψ が交換関係（55.6）[46.6] にしたがう場合でも，反交換関係（55.18）[46.24] にしたがう場合でも

$$[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}'',t)]=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'',t)$$

が成り立つ．これより

$$\begin{aligned}&[\psi(\mathbf{r},t),\nabla'\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\cdot\nabla'\psi(\mathbf{r}',t)]=\nabla'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\nabla'\psi(\mathbf{r}',t),\\&[\psi(\mathbf{r},t),(\nabla'\psi^\dagger(\mathbf{r}',t))\psi(\mathbf{r}',t)]=(\nabla'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))\psi(\mathbf{r}',t),\\&[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\nabla'\psi(\mathbf{r}',t)]=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\nabla'\psi(\mathbf{r}',t),\\&[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)]=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',t)\end{aligned}\tag{3}$$

が得られる．また

$$\begin{aligned}&[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}',t)]\\&\quad=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}',t)+\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}'',t)\end{aligned}\tag{4}$$

も ψ が Einstein-Bose 粒子を記述する場合でも Fermi-Dirac 粒子を記述する場合でも成り立つ．

ψ とハミルトニアン（1）の第一項との交換子括孤は ψ と $\mathbf{A}$ とは交換し，V は c-数であるから（3）より

$$\begin{aligned}&\Big[\psi(\mathbf{r},t),\int\Big\{\frac{1}{2m}\Big[\Big(i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\Big)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\Big]\cdot\Big[\Big(-i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\Big)\psi(\mathbf{r}',t)\Big]\\&\quad+V(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\Big\}d^3r'\Big]\\&=\int\Big\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\nabla'\psi(\mathbf{r}',t)+\frac{1}{2m}\Big(-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\Big)\cdot\Big(-i\hbar\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\nabla'\psi(\mathbf{r}',t)\Big)\\&\quad+\frac{1}{2m}i\hbar(\nabla'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))\psi(\mathbf{r}',t)\cdot\Big(-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\Big)\\&\quad+\frac{1}{2m}\frac{e^2}{c^2}(\mathbf{A}(\mathbf{r}',t))^2\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',t)+V(\mathbf{r}',t)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',t)\Big\}d^3r'\end{aligned}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) + \frac{i\hbar e}{2mc}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot\nabla\psi(\mathbf{r},t) + \frac{i\hbar e}{2mc}\nabla\cdot(\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t))$$

$$+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$$

となる．また ψ とハミルトニアンの第二項とは交換し，第三項との交換子括孤は（4）より

$$\left[\psi(\mathbf{r},t), \frac{e^2}{2}\iint\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|}d^3r'd^3r''\right]$$

$$= e^2\int\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r'\psi(\mathbf{r},t) \qquad (5)$$

となる．したがって運動方程式（2）は

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla + \frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla\cdot\mathbf{A}) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2\right.$$

$$\left.+ee\int\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r' + V\right]\psi$$

となり（44.1）と比較すると ϕ を $e\int|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)d^3r'$ に置き換えたものになっている．

もしハミルトニアン（1）の最後の項を（57.11）のまま

$$\frac{e^2}{2}\iint\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3rd^3r'$$

とすると（4）のかわりに

$$[\psi(\mathbf{r},t), \psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t)]$$

$$=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t) + \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}'',t) \qquad (4)'$$

を用いると（5）のかわりに

$$\frac{e^2}{2}\psi(\mathbf{r},t)\int\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r' + \frac{e^2}{2}\int\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r'\psi(\mathbf{r},t)$$

が得られる．この第一項を（反）交換関係を用いてうしろにもってくると全体として

$$e^2\int\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r'\psi(\mathbf{r},t) + \frac{e^2}{2}\int\frac{\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\psi(\mathbf{r}',t)d^3r'$$

となりこの第二項は無限大である．

問題XIV-19　[第2版，XIV-問11に類似]

(55.6) [46.6] または (55.18) [46.24] の括弧式および (56.21) [48.21] のそれは，問題18のハミルトニアンに対しては時間について一定になっていることを証明せよ．

〔**解**〕 問題XIV-18 の結果を用いると

$$[\psi, H]=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi+V\psi+e^2\int\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r'\psi, \tag{1}$$

$$[\psi^\dagger, H]=-\frac{1}{2m}\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\psi^\dagger-V\psi^\dagger-\psi^\dagger e^2\int\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r' \tag{2}$$

が成り立つことがわかる．また $\mathbf{A}$ と $\mathbf{P}_1$ との交換関係として (56.21) [48.21] で $P_{s'}$ を $P_{1s'}$ に置き換えたものを採用すると

$$\begin{aligned}[A_s(\mathbf{r},t), H]&=4\pi c^2\sum_{s'}\int\left\{i\hbar\delta_{ss'}\,\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-\frac{i\hbar}{4\pi}\frac{\partial}{\partial r_s}\frac{\partial}{\partial r'_{s'}}\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\right\}P_{1s'}(\mathbf{r}',t)d^3r'\\
&=4\pi c^2 i\hbar P_{1s}(\mathbf{r},t)-c^2 i\hbar\frac{\partial}{\partial r_s}\int\left(\nabla'\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\cdot\mathbf{P}_1(\mathbf{r}',t)d^3r'\\
&=4\pi c^2 i\hbar P_{1s}(\mathbf{r},t)+c^2 i\hbar\frac{\partial}{\partial r_s}\int\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\nabla'\cdot\mathbf{P}_1(\mathbf{r}',t)d^3r'\end{aligned}$$

となり，$\nabla\cdot\mathbf{P}_1=0$ より

$$[\mathbf{A}, H]=4\pi c^2 i\hbar\,\mathbf{P}_1 \tag{3}$$

を得る．また

$$\begin{aligned}[P_{1s}(\mathbf{r},t),\ H]=&\int\left\{\frac{1}{2m}\left[i\hbar(\nabla'\psi^\dagger(\mathbf{r}',t))\cdot\left(-\frac{e}{c}\right)[P_{1s}(\mathbf{r},t), \mathbf{A}(\mathbf{r}',t)]\psi(\mathbf{r}',t)\right.\right.\\
&+\left(-\frac{e}{c}\right)[P_{1s}(\mathbf{r},t), \mathbf{A}(\mathbf{r}',t)]\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\cdot(-i\hbar\nabla'\psi(\mathbf{r}',t))\\
&\left.\left.+\frac{e^2}{c^2}\times 2\times[P_{1s}(\mathbf{r},t), \mathbf{A}(\mathbf{r}',t)]\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\right]\right\}d^3r'\\
&+\int\frac{1}{4\pi}[P_{1s}(\mathbf{r},t), \nabla'\times\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)]\cdot\nabla'\times\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)d^3r'\end{aligned} \tag{4}$$

において右辺第一項は

$$\frac{1}{2m}\times\frac{i\hbar}{c}\times\frac{e\hbar}{i}\left[-\left(\frac{\partial}{\partial r_s}\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\right)\psi(\mathbf{r},t)+\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\frac{\partial}{\partial r_s}\psi(\mathbf{r},t)\right]$$

$$+\frac{i\hbar}{c}\times\left(-\frac{e^2}{mc}\right)A_s(\mathbf{r},t)\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$$

$$+\int\left\{\frac{1}{2m}\left[i\hbar(\nabla'\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\cdot\left(-\frac{e}{c}\right)\frac{i\hbar}{4\pi}\left(\frac{\partial}{\partial r_s}\nabla'\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\right)\psi(\mathbf{r}',t)\right.\right.$$

$$+\left(-\frac{e}{c}\right)\frac{i\hbar}{4\pi}\left(\frac{\partial}{\partial r_s}\nabla'\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\right)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\cdot(-i\hbar\nabla'\psi(\mathbf{r}',t))$$

$$\left.\left.+\frac{e^2 i\hbar}{2\pi c^2}\left(\frac{\partial}{\partial r_s}\nabla'\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\right)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\right]\right\}d^3r'$$

となり

$$\mathbf{J}=\frac{e\hbar}{2im}[\psi^\dagger\nabla\psi-(\nabla\psi^\dagger)\psi]-\frac{e^2}{mc}\mathbf{A}\psi^\dagger\psi$$

とおくとこれは

$$\frac{i\hbar}{c}\left[\mathbf{J}-\frac{1}{4\pi}\nabla\int\left(\nabla'\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r}',t)d^3r'\right]_s$$

$$=\frac{i\hbar}{c}\left[\mathbf{J}+\frac{1}{4\pi}\nabla\int\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\nabla'\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r}',t)d^3r'\right]_s$$

と書ける．また（4）の右辺第二項は

$$\sum_i\int\frac{1}{4\pi}\left[P_{1s}(\mathbf{r},t),\ \sum_{jk}\epsilon_{ijk}\frac{\partial}{\partial r'_j}A_k(\mathbf{r}',t)\right]\sum_{lm}\epsilon_{ilm}\frac{\partial}{\partial r'_l}A_m(\mathbf{r}',t)d^3r'$$

$$=\sum_i\int\frac{1}{4\pi}\cdot\sum_{jk}\epsilon_{ijk}\frac{\partial}{\partial r'_j}\left\{-i\hbar\delta_{sk}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')+\frac{i\hbar}{4\pi}\frac{\partial}{\partial r'_k}\frac{\partial}{\partial r_s}\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\right\}$$

$$\times\sum_{lm}\epsilon_{ilm}\frac{\partial}{\partial r'_l}A_m(\mathbf{r}',t)d^3r'$$

$$=\frac{i\hbar}{4\pi}\sum_{ijlm}\epsilon_{ijs}\epsilon_{ilm}\frac{\partial}{\partial r_j}\frac{\partial}{\partial r_l}A_m(\mathbf{r},t)=-\frac{i\hbar}{4\pi}(\nabla\times\nabla\times\mathbf{A})_s$$

であるから $\mathbf{P}_1$ と H との交換子括弧は

$$[\mathbf{P}_1,\ H]=-\frac{i\hbar}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}+\frac{i\hbar}{c}\left[\mathbf{J}+\frac{1}{4\pi}\nabla\int\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\nabla'\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r}',t)d^3r'\right]\quad(5)$$

となる．（3）式は（57.5）の上式と一致している．（5）式は右辺第二項が

$$\nabla\cdot\left(\mathbf{J}+\frac{1}{4\pi}\nabla\int\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\nabla'\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r}',t)d^3r'\right)$$

$$=\nabla\cdot\mathbf{J}+\frac{1}{4\pi}\int(-4\pi\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))\nabla'\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r}',t)d^3r'=0$$

を満たすことに注意すると（57.5）の下式でソレノイダルな部分をとり出したものにな

っている．

次に（反）交換子括弧が時間に関して一定であることを見るためにまず

$$[[A, B]_{\mp}, H]_- = [[A, H]_-, B]_{\mp} + [A, [B, H]_-]_{\mp}$$

が一般に成り立つことに注意する．ここに $[\ ,\ ]_-$ は交換子括弧，$[\ ,\ ]_+$ は反交換子括弧をあらわすものとする．

$A=\psi(\mathbf{r},t)$，$B=\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)$ とおくと

$$[[\psi(\mathbf{r},t), \psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_{\mp}, H]_- = [[\psi(\mathbf{r},t), H]_-, \psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_{\mp}$$
$$+[\psi(\mathbf{r},t), [\psi^\dagger(\mathbf{r}',t), H]_-]_{\mp}$$

となり（1），（2）を用いるとこれは

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_{\mp}+V(\mathbf{r},t)[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_{\mp}$$
$$+e^2\int\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}''|}[\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_{\mp}d^3r''$$
$$-\frac{1}{2m}\left(i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\right)^2[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_{\mp}-V(\mathbf{r}',t)[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_{\mp}$$
$$-e^2\int\frac{1}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|}[\psi(\mathbf{r},t),\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t)]_{\mp}d^3r''$$

となる．ここで交換関係（55.6）[46.6] または反交換関係（55.18）[46.24] を用いるとこれは

$$\frac{1}{2m}\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2-\left(i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\right)^2\right]\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$
$$+(V(\mathbf{r},t)-V(\mathbf{r}',t))\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (6)$$
$$+e^2\int\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}''|}\left(\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t)\pm\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r},t)\right)d^3r''$$
$$-e^2\int\frac{1}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|}\left(\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^\dagger(\mathbf{r}'',t)\psi(\mathbf{r}'',t)\pm\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}'',t)\right)d^3r''$$

となり明らかに零である(※追加⇨380*p*)．$[\psi(\mathbf{r},t),\ \psi(\mathbf{r}',t)]_{\mp}$ や $[\psi^\dagger(\mathbf{r},t),\ \psi^\dagger(\mathbf{r}',t)]_{\mp}$ についても同様に計算できて，ハミルトニアンとの交換子括弧は零となる．また

$$[[A_s(\mathbf{r},t), P_{1s'}(\mathbf{r}',t)], H]$$
$$=[[A_s(\mathbf{r},t), H], P_{1s'}(\mathbf{r}',t)]+[A_s(\mathbf{r},t), [P_{1s'}(\mathbf{r}',t), H]]$$

については（3），（5）より $[A_s(\mathbf{r},t), H]$ は $\mathbf{A}$ を含まず，$[P_{1s'}(\mathbf{r}',t), H]$ は $\mathbf{P}_1$ を含んでいないから各項が零になることがわかる．

〔注意〕 $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ と $\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)$ との交換子括孤が H と交換することは（3）より直ちに出るが，$\mathbf{P}_1(\mathbf{r},t)$ と $\mathbf{P}_1(\mathbf{r}',t)$ との交換子括孤が H と交換することを見るための計算は（5）を用いれば行なえるが相当こみ入っている．

問題XIV-20　［第3版］

(57.16) の表式は，同一の状態 k に n_k 個の Einstein-Bose 粒子が存在するとした場合の §40 の議論から，n_k の任意の値に対して得られることを証明せよ．

〔**解**〕 状態 k に1個の粒子が存在するときの波動関数を

$$u_k(\mathbf{r})\ ;\ \int|u_k(\mathbf{r})|^2d^3r=1$$

とすると状態 k に n_k 個 Einstein-Bose 粒子が存在するときの波動関数は近似的に（40.10）より

$$u_k(\mathbf{r}_1)\ u_k(\mathbf{r}_2)\cdots u_k(\mathbf{r}_{n_k})$$

で与えられる．この波動関数によるクーロン相互作用エネルギー

$$\sum_{1\leqq i<j\leqq n_k}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|}$$

の期待値は

$$\iint\cdots\int u_k^*(\mathbf{r}_1)u_k^*(\mathbf{r}_2)\cdots u_k^*(\mathbf{r}_{n_k})\left(\sum_{1\leqq i<j\leqq n_k}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|}\right)u_k(\mathbf{r}_1)u_k(\mathbf{r}_2)\cdots$$
$$\times u_k(\mathbf{r}_{n_k})d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2\cdots d\mathbf{r}_{n_k}$$
$$=\sum_{1\leqq i<j\leqq n_k}e^2\iint\frac{|u_k(\mathbf{r}_i)|^2|u_k(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|}d\mathbf{r}_id\mathbf{r}_j=\left(\sum_{1\leqq i<j\leqq n_k}1\right)$$
$$\times e^2\iint\frac{|u_k(\mathbf{r})|^2|u_k(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}d\mathbf{r}'$$

となり

$$\sum_{1\leqq i<j\leqq n_k}1={}_{n_k}C_2=\frac{n_k(n_k-1)}{2}$$

であるから (57.16) と一致する．

〔追加〕

※(378pより)

(6)式の第一項が零であることの説明を補足しておく．明らかに

$$\left(i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\right)^2\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\left(i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\right)\cdot\left(i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\right)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

$$=\left(i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\right)\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

が成り立つ．二つの作用素 $i\hbar\nabla'-(e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)$ と $-i\hbar\nabla-(e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ とは明らかに可換であるから上式は

$$\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)\cdot\left(i\hbar\nabla'-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}',t)\right)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

$$=\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

と変形され，(6)の第一項で相殺が生じ零となることがわかる．

〔著 者 紹 介〕

三枝寿勝（さえぐさ としかつ）
昭和38年京都大学理学部卒
現在東京外国語大学教授
理学修士

瀬藤憲昭（せとう のりあき）
昭和38年京都大学理学部卒
現在広島大学工学部教授
理学博士

量子力学演習

1971年7月15日　第1刷発行
2009年7月25日　第22刷発行

著　者　三　枝　寿　勝
　　　　瀬　藤　憲　昭

発行者　吉　岡　　誠

発行所　〒606-8225 京都市左京区田中門前町87
（物理学叢書別巻）　株式会社 吉　岡　書　店
電話(075)781-4747／振替京都01030-8-4624

組版／同朋舎・印刷／一進印刷・製本／藤沢製本

ISBN978-4-8427-0179-0